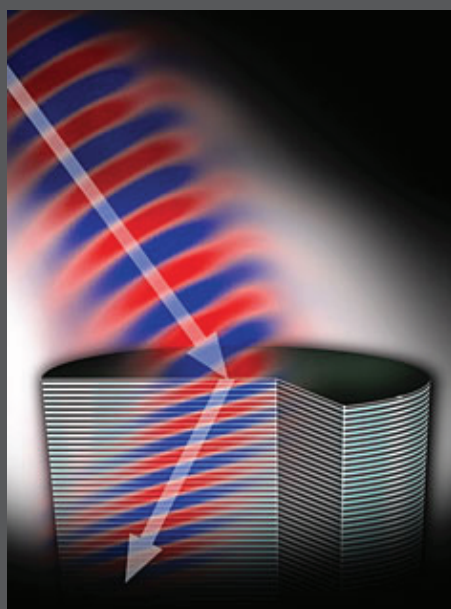




ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

Εκπομπή και Διάδοση Φωτός σε
Νανοδομημένα Πλασμονικά Μεταύλικά



Χρήστος Τσερκέζης

Διδακτορική διατριβή

Αθήνα, Απρίλιος 2012



Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο - ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος "Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση" του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) - Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: Ηράκλειτος II. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου.

Στην οικογένειά μου

Summary

In this thesis we study, by means of rigorous numerical calculations by the layer-multiple-scattering method, the optical properties of periodic plasmonic nanostructures and examine, among others, the possibility of assimilating them to equivalent homogeneous media (metamaterials), focusing on the occurrence of negative refraction. We first study periodic structures of metallic nanoshells, i.e., composite spherical nanoparticles in which, due to their spherical shape, the fundamental plasmon mode, which manifests itself as a resonance of electric type, is threefold degenerate. We then examine the optical response of periodic structures of metallic nanorods, where the threefold degeneracy of the plasmon modes is lifted due to the cylindrical shape, and of metallodielectric nanosandwiches, where hybridization between the plasmon modes leads to a magnetic resonance. The possibility of a successful homogenization of the above structures is at first investigated through the standard S -matrix retrieval method, which is based on the complex transmission and reflection coefficients of a finite slab. Moreover, we propose a method to resolve the difficulties and artefacts which appear in the calculation of effective permittivities and permeabilities for thick slabs, based on the complex photonic band structure and the reflection coefficient of the corresponding infinite and semi-infinite crystal, respectively. Application of the method to periodic arrays of metallodielectric nanosandwiches shows that such structures exhibit negative effective permeability that can be tuned within the frequency region of the visible and near-infrared. We then develop a new method to determine local effective electromagnetic parameters for the general case of anisotropic metamaterials, based on the results of rigorous calculations of the complex photonic band structure and the reflectivity of the semi-infinite crystal, valid for every angle of incidence. This method, which provides strong intrinsic criteria to control the validity of the results, combined with an analysis of isofrequency surfaces introduced for the first time in the framework of the layer-multiple-scattering method, is applied to all of the above structures and shows that in any case the occurrence of negative refraction is possible. In addition to the above, we develop an exact method to calculate photonic surface states and show that, contrary to earlier claims, the appearance of surface states, which are easily tunable, is possible in metallodielectric photonic crystals, while their propagation length makes them useful for waveguiding applications. Moreover, we examine the optical response of periodic structures of metallic nanorods, in the presence and absence of a supporting substrate, and show that such structures support various types of collective plasmonic excitations, among which there exist modes with zero and near-zero group velocity which amplify the evanescent waves and allow for subwavelength imaging and waveguiding applications. We also calculate, by means of full-electrodynamic calculations without any adjustable parameter, the dispersion diagrams of linear periodic chains of nanorods, and examine their dependence on the geometrical characteristics of the structure (nanorod height and separation). The results are compared to those obtained by the commonly employed coupled-dipole model and the efficiency and limitations of the latter are discussed. Finally, we study the interaction of active emitters, modelled as point dipoles, with single nanoparticles and periodic photonic structures, using a Green's function formalism.

Περίληψη

Στην παρούσα διατριβή μελετήθηκαν, με ακριβείς υπολογισμούς μέσω της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, οι οπτικές ιδιότητες περιοδικών πλασμονικών νανοδομών και, μεταξύ άλλων, εξετάστηκε η δυνατότητα εξομοίωσής τους με ισοδύναμα ομοιογενή μέσα (μεταύλικά), εστιάζοντας στην εμφάνιση του φαινομένου της αρνητικής διάθλασης. Αρχικά μελετήθηκαν δομές από μεταλλικούς νανοφλοιούς. Πρόκειται για σύνθετα σφαιρικά σωματίδια στα οποία, λόγω του σφαιρικού τους σχήματος, η θεμελιώδης πλασμονική κατάσταση, που εκδηλώνεται ως συντονισμός ηλεκτρικού τύπου, είναι τριπλά εκφυλισμένη. Στη συνέχεια εξετάστηκαν περιοδικές δομές μεταλλικών νανοκυλίνδρων, όπου λόγω της ανισοτροπίας ο τριπλός εκφυλισμός αίρεται, και τέλος, δομές μεταλλοδιηλεκτρικών νανოსάντουιτς, στα οποία ο υβριδισμός μεταξύ των πλασμονικών καταστάσεων οδηγεί στην εμφάνιση μαγνητικού συντονισμού. Η δυνατότητα ομοιογενοποίησης των παραπάνω δομών διερευνήθηκε αρχικά μέσω της διαδεδομένης μεθόδου αντίστροφης σκέδασης, που βασίζεται στους μιγαδικούς συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης ενός πεπερασμένου πλακιδίου του υλικού, και προτάθηκε μια μέθοδος άρσης των δυσκολιών και ασαφειών στον υπολογισμό ισοδύναμης επιδεκτικότητας και διαπερατότητας για πλακίδια σχετικά μεγάλου πάχους, βασισμένη στη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών και στον συντελεστή ανάκλασης του άπειρου και ημιάπειρου κρυστάλλου, αντίστοιχα. Για τον σκοπό αυτό, η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης επεκτάθηκε ώστε να υπολογίζει απευθείας τους μιγαδικούς συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης από πεπερασμένα πλακίδια, αλλά και τον συντελεστή ανάκλασης στη διεπιφάνεια μεταξύ μιας ημιάπειρης φωτονικής δομής και ενός ημιάπειρου ομοιογενούς μέσου. Η εφαρμογή της μεθόδου σε περιοδικές δομές από μεταλλοδιηλεκτρικά νανοςάντουιτς έδειξε ότι τέτοιες δομές εμφανίζουν αρνητική ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα στην περιοχή του ορατού και υπερύθρου. Στη συνέχεια αναπτύχθηκε μια νέα μέθοδος προσδιορισμού τοπικών ηλεκτρομαγνητικών συντελεστών ισοδύναμου μέσου, που ισχύουν για πρόσπτωση υπό οποιαδήποτε γωνία, στη γενική περίπτωση ανισοτροπικών μεταύλικών, βασισμένη στα αποτελέσματα διεξοδικών υπολογισμών της μιγαδικής φωτονικής δομής ζωνών και του συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου. Η μέθοδος αυτή, που παρέχει ισχυρά εσωτερικά κριτήρια για τον έλεγχο της ακρίβειας των αποτελεσμάτων, σε συνδυασμό με μια ανάλυση των επιφανειών σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου που εισήχθη για πρώτη φορά στα πλαίσια της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, εφαρμόστηκε σε όλες τις υπό μελέτη δομές και έδειξε ότι σε κάθε περίπτωση είναι δυνατή η εμφάνιση αρνητικής διάθλασης. Πέραν της ομοιογενοποίησης, αναπτύχθηκε μια ακριβής μέθοδος υπολογισμού επιφανειακών καταστάσεων σε φωτονικούς κρυστάλλους και δείχθηκε ότι, σε αντίθεση με ό,τι υποστηριζόταν στη βιβλιογραφία, η ύπαρξη επιφανειακών καταστάσεων, που μάλιστα ρυθμίζονται εύκολα στη συχνότητα, είναι δυνατή σε μεταλλοδιηλεκτρικούς φωτονικούς κρυστάλλους, ενώ το μήκος διάδοσης αυτών των καταστάσεων τις καθιστά χρήσιμες για εφαρμογές κυματοδηγησης. Επιπλέον, μελετήθηκε η οπτική απόκριση περιοδικών διατάξεων μεταλλικών νανοκυλίνδρων, με και χωρίς υπόστρωμα, και δείχθηκε ότι οι δομές αυτές υποστηρίζουν διάφορους τύπους συλλογικών πλασμονικών διεγέρσεων, μεταξύ των οποίων υπάρχουν καταστάσεις μηδενικής και σχεδόν μηδενικής ταχύτητας ομάδος που μπορούν να αξιοποιηθούν σε εφαρμογές υπερφασκών και κυματοδηγών με περιορισμό σε διαστάσεις μικρότερες του μήκους κύματος. Υπολογίστηκε επίσης, με ακριβείς υπολογισμούς και χωρίς προσδιορισμένες παραμέτρους, η σχέση διασποράς σε γραμμικές αλυσίδες νανοκυλίνδρων και η

εξάρτησή της από τη γεωμετρία της υπό μελέτη διάταξης (ύψος και απόσταση νανοκυλίνδρων). Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με ένα ευρέως χρησιμοποιούμενο μοντέλο συζευγμένων διπόλων και συνάχθησαν χρήσιμα συμπεράσματα σχετικά με την ακρίβεια και τους περιορισμούς του μοντέλου. Τέλος, μελετήθηκε η αλληλεπίδραση ενεργών κέντρων, που περιγράφονται ως σημειακά δίπολα, με μεμονωμένα πλασματικά σωματίδια και περιοδικές φωτονικές δομές, με βάση έναν φορμαλισμό που βασίζεται στην τεχνική των συναρτήσεων Green.

Δημοσιεύσεις

Σε διεθνή περιοδικά

1. C. Tserkezis, G. Gantzounis, and N. Stefanou, *Collective plasmonic modes in ordered assemblies of metallic nanoshells*, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 075232 (2008).
2. C. Tserkezis, N. Papanikolaou, G. Gantzounis, and N. Stefanou, *Understanding artificial optical magnetism of periodic metal-dielectric-metal layered structures*, Phys. Rev. B **78**, 165114 (2008).
3. N. Stefanou, G. Gantzounis, and C. Tserkezis, *Multiple-scattering calculations for plasmonic nanostructures*, Int. J. Nanotechnol. **6**, 137 (2009). **Invited Paper.**
4. C. Tserkezis, *Effective parameters for periodic photonic structures of resonant elements*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 155404 (2009).
5. C. Tserkezis, N. Papanikolaou, E. Almpanis, and N. Stefanou, *Tailoring plasmons with metallic nanorod arrays*, Phys. Rev. B **80**, 125124 (2009). **Also appeared in Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology** **20**, OCT 5 (2009).
6. C. Tserkezis and N. Stefanou, *Retrieving local effective constitutive parameters for anisotropic photonic crystals*, Phys. Rev. B **81**, 115112 (2010).
7. C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Effective optical parameters of thin-film and bulk metamaterials of metallodielectric nanosandwiches*, Opt. Commun. **283**, 4074 (2010).
8. C. Tserkezis and N. Stefanou, *Uniaxial crystals of metallodielectric nanosandwiches: Effective optical parameters and negative refraction*, J. Opt. **12**, 115103 (2010).
9. C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Extraordinary refractive properties of photonic crystals of metallic nanorods*, J. Opt. Soc. Am. B **27**, 2620 (2010).
10. C. Tserkezis and N. Stefanou, *Negative refraction in plasmonic crystals of metallic nanoshells*, Metamaterials **5**, 169 (2011).
11. C. Tserkezis, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, *Photonic surface states in plasmonic crystals of metallic nanoshells*, Phys. Rev. B **84**, 115455 (2011).
12. C. Tserkezis and N. Stefanou, *Calculation of waveguide modes in linear chains of metallic nanorods*, J. Opt. Soc. Am. B **29**, 827 (2012).

Σε πρακτικά συνεδρίων (σε διεθνή περιοδικά ή ειδικούς τόμους)

1. X. Τσερκέζης, Γ. Γκαντζούνης, και Ν. Στεφάνου, *Οπτικές ιδιότητες περιοδικών δομών μεταλλικών νανοφλοιών, στα “Πρακτικά του XXIII Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, 23-26 Σεπτεμβρίου 2007”*.

2. N. Stefanou, C. Tserkezis, and G. Gantzounis, *Plasmonic excitations in ordered assemblies of metallic nanoshells*, Proc. SPIE **6989**, 698910 (2008).
3. C. Tserkezis, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, *Negative effective permeability of multilayers of ordered arrays of metal-dielectric nanosandwiches*, Proc. SPIE **7353**, 735305 (2009).
4. C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Coupled plasmons and resonant effective permeability of metal-dielectric-metal nanosandwich assemblies*, **στα** “Πρακτικά του XXV Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, 20-23 Σεπτεμβρίου 2009”.
5. E. Almpanis, N. Papanikolaou, C. Tserkezis, and N. Stefanou, *Optical response of plasmonic nanoantenna arrays*, **στα** “Πρακτικά του XXV Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, 20-23 Σεπτεμβρίου 2009”.
6. N. Stefanou, N. Papanikolaou, and C. Tserkezis, *Plasmonic nanostructures and optical metamaterials: Studies by the layer-multiple-scattering method*, Physica B **405**, 2967 (2010).
7. C. Tserkezis and N. Stefanou, *All-angle homogenization of anisotropic photonic metamaterials*, **στα** “Πρακτικά του XXVI Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, 26-29 Σεπτεμβρίου 2010”.
8. C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Collective plasmon modes and negative refraction in metallodielectric nanostructures*, **in** “Proceedings of the YSMM11 Workshop on Metamaterials and 4th Young Scientist Meeting on Metamaterials, 14-16 February 2011 ”. **Best Paper Prize**.
9. N. Papanikolaou, C. Tserkezis, G. Gantzounis, E. Almpanis, and N. Stefanou, *Controlling light with plasmonic nanostructures*, **στα** “Πρακτικά του XXVII Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, 18-21 Σεπτεμβρίου 2011”.
10. C. Tserkezis and N. Stefanou, *Negative refraction and polarization filtering in a photonic crystal of metallic nanoshells*, **in** “Proceedings of the 5th International Congress on Advanced Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials 2011), 10-15 October 2011”.

Πρόλογος

Η παρούσα διδακτορική διατριβή εκπονήθηκε στο Τμήμα Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών, από τον Ιανουάριο του 2008 μέχρι τον Απρίλιο του 2012, με κύριο επιβλέποντα τον Καθηγητή Ν. Στεφάνου, έναν εξαιρετικό επιστήμονα που είχα την τύχη να με καθοδηγεί για περισσότερα από επτά χρόνια, από την εποχή της προπτυχιακής διπλωματικής εργασίας μου.

Στην Τριμελή Συμβουλευτική Επιτροπή συμμετείχαν επίσης η Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Μ. Καλαμιώτου και ο Επίκουρος Καθηγητής Ν. Σαρλής, τους οποίους ευχαριστώ για τη στήριξη κατά την εκπόνηση της διατριβής και τις παρατηρήσεις επί του τελικού χειμένου. Επίσης ευχαριστώ τον Καθηγητή Π. Βαρώτσο, τον Καθηγητή Γ. Τριμπέρη, τον Καθηγητή Δ. Φραντζεσκάκη και την Επίκουρη Καθηγήτρια Ι. Ζεργιώτη, που συμμετείχαν στην Επταμελή Εξεταστική Επιτροπή.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω όλο το προσωπικό του Τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, μέλη ΔΕΠ, ερευνητές και μεταπτυχιακούς φοιτητές, και ιδιαίτερα τις Δρ. Μ. Δημακογιάννη, Δρ. Α. Ζώρα και Δρ. Μ. Τσέτσερη, τον Δρ. Ν. Φυτά, τον Υπ. Δρ. Γ. Γεωργίου και τη μεταπτυχιακή φοιτήτρια Χ. Πλεμμένου, με τους οποίους μοιράστηκα για λιγότερο ή περισσότερο καιρό αρμονικά τον ίδιο χώρο.

Επίσης, θέλω να ευχαριστήσω τα μέλη και συνεργάτες της ερευνητικής ομάδας στην οποία ανήκα: τον Δρ. Ι. Ψαρόμπα, την Υπ. Δρ. Α. Χριστοφή και τον Υπ. Δρ. Ε. Αλμπάνη, και ιδιαίτερα τους Δρ. Ν. Παπανικολάου και Δρ. Γ. Γκαντζούνη, για την εξαιρετική συνεργασία.

Τέλος, πάνω απ' όλους, ευχαριστώ τους γονείς μου Θανάση και Κατερίνα, την αδελφή μου Έμμα, και τον δάσκαλό μου Νίκο Στεφάνου. Αυτή η διατριβή δε θα μπορούσε να ολοκληρωθεί χωρίς τη στήριξη και των τεσσάρων.

X.T.



Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο - ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος "Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση" του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) - Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: Ηράκλειτος II. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου.

Περιεχόμενα

Summary	iii
Περίληψη	v
Δημοσιεύσεις	ii
Σε διεθνή περιοδικά	ii
Σε πρακτικά συνεδρίων (σε διεθνή περιοδικά ή ειδικούς τόμους)	ii
Πρόλογος	ix
Εισαγωγή	1
1 Στοιχεία ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας	5
1.1 Οι εξισώσεις του Maxwell στην ύλη	5
1.2 Η διεπιφάνεια μεταξύ δύο ομοιογενών μέσων	11
1.3 Υπερφασκοί αρνητικής διάθλασης	18
1.4 Λύση της κυματικής εξίσωσης σε μορφή σφαιρικών κυμάτων	20
2 Η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης	23
2.1 Σκέδαση από μεμονωμένο σχεδαστή	24
2.2 Θεωρία πολλαπλής σκέδασης	33
2.3 Διδιάστατη περιοδική δομή	37
2.4 Ομοιογενές πλακίδιο	44
2.5 Σύνητο πλακίδιο	45
2.6 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου	48
2.7 Ημιάπειρος κρύσταλλος	51
2.8 Επιφάνειες σταθερής συχνότητας	53
3 Ομοιογενοποίηση περιοδικών φωτονικών δομών	57
3.1 Φωτονική δομή ζωνών	59
3.2 Η προσέγγιση Maxwell-Garnett	61
3.3 Ομοιογενοποίηση πλακιδίου με τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης	64
3.4 Ομοιογενοποίηση άπειρου κρυστάλλου	68
4 Περιοδικές δομές μεταλλικών νανοφλοιών	73
4.1 Σκέδαση από μεμονωμένο νανοφλοιό	74
4.2 Ενίσχυση εκπομπής φθορισμού κοντά σε μεταλλικό νανοφλοιό	77
4.3 Διδιάστατα πλέγματα νανοφλοιών	82
4.4 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου	84

4.5	Αρνητική διάθλαση και φθίνοντα κύματα	88
4.6	Ομοιογενοποίηση ανισοτροπικού κρυστάλλου	92
4.7	Επιφανειακές καταστάσεις σε κρυστάλλους μεταλλικών νανοφλοιών	96
5	Περιοδικές δομές μεταλλικών νανοκυλίνδρων	103
5.1	Σκέδαση από μεμονωμένο νανοκύλινδρο	104
5.2	Διδιάστατα πλέγματα νανοκυλίνδρων	107
5.3	Ενίσχυση εκπομπής φθορισμού κοντά σε επίπεδο μεταλλικών νανοκυλίνδρων .	110
5.4	Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου	113
5.5	Ομοιογενοποίηση άπειρου κρυστάλλου	116
5.6	Αρνητική διάθλαση και αυτοσευθυγράμμιση	118
5.7	Κυματοδηγοί γραμμικών αλυσίδων μεταλλικών νανοκυλίνδρων	121
6	Περιοδικές δομές μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσάντουιτς	129
6.1	Πλασμονικός υβριδισμός σε ένα μεταλλοδιηλεκτρικό νανοσάντουιτς	130
6.2	Διδιάστατα πλέγματα και αρνητική μαγνητική διαπερατότητα	132
6.3	Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου	136
6.4	Ομοιογενοποίηση πλακιδίων και άπειρου κρυστάλλου	137
6.5	Αρνητική διάθλαση	141
	Συμπεράσματα	145
	Παραρτήματα	147
	A' Διανυσματικές ταυτότητες	147
	B' Συναρτήσεις Bessel	149
	Γ' Σφαιρικές αρμονικές	153
	Δ' Το υδροδυναμικό μοντέλο	157
	Ε' Πίνακας σκέδασης μεταλλικού νανοφλοιού με μη τοπικούς όρους	161
	ϵ' Η συνάρτηση Green	163
	Z' Αλλαγή βάσης κυμάτων	171
	Βιβλιογραφία	174

Εισαγωγή

Το 1968 ο Victor Veselago έδειξε ότι όταν ένα ηλεκτρομαγνητικό (ΗΜ) κύμα προσπίπτει σε ένα ομοιογενές μέσο που χαρακτηρίζεται από αρνητική (σχετική) διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ , και αρνητική (σχετική) μαγνητική διαπερατότητα, μ , διαθλάται αρνητικά (με γωνία αντίθετη από αυτή σε ένα μέσο θετικών ϵ και μ). Επιπλέον, οι ακτίνες που προσπίπτουν σε ένα πλακίδιο που χαρακτηρίζεται από $\epsilon = \mu = -1$ από τα αριστερά εστιάζουν σε ένα σημείο στα δεξιά του πλακιδίου [1]. Τέτοια υλικά όμως δεν απαντώνται στη φύση, ενώ την εποχή του Veselago δεν ήταν δυνατό να προκύψουν ως συνδυασμός διαφορετικών συστατικών· ενώ η φύση διαθέτει αφθονία υλικών με αρνητική διηλεκτρική συνάρτηση, όπως είναι για παράδειγμα τα μέταλλα στην περιοχή του υπεριώθρου και ορατού [2], δεν ισχύει το ίδιο για τη μαγνητική διαπερατότητα [3]. Συνεπώς, η εργασία του Veselago, αν και ενδιαφέρουσα από θεωρητική άποψη, αγνοήθηκε για πάρα πολλά χρόνια, μια και αναφερόταν σε μια καθαρά υποθετική περίπτωση. Αυτό έμελε να αλλάξει στις αρχές της προηγούμενης δεκαετίας, όταν δείχθηκε για πρώτη φορά ότι ένα σύνθετο υλικό, αποτελούμενο από ανοιχτούς μεταλλικούς δακτυλίους, μπορεί να παρουσιάζει συμπεριφορά αντίστοιχη αυτής ενός ισοδύναμου ομοιογενούς μέσου με αρνητική μαγνητική διαπερατότητα [4]. Σύντομα εξάλλου οι ανοιχτοί δακτύλιοι συνδυάστηκαν με μεταλλικά σύρματα για να δώσουν ένα μέσο με αρνητική διηλεκτρική συνάρτηση και μαγνητική διαπερατότητα ταυτόχρονα [5,6]. Εμπνευσμένος από τη δουλειά του Veselago, ο Pendry έδειξε το 2000 ότι ένα πλακίδιο από υλικό με $\epsilon = \mu = -1$, ο σχεδιασμός του οποίου δεν έμοιαζε πλέον εξωπραγματικός, όχι μόνο διαθλά αρνητικά τις διαδιδόμενες συνιστώσες του πεδίου μιας σημειακής πηγής, αλλά επιπλέον ενισχύει τις φθίνουσες συνιστώσες, επιτρέποντας τον σχηματισμό ενός ακριβούς ειδώλου της πηγής, χωρίς απώλειες, στην άλλη του πλευρά [7]. Με άλλα λόγια, ένα τέτοιο πλακίδιο λειτουργεί ως *υπερφακός*, με διακριτική ικανότητα που δεν περιορίζεται από το μήκος κύματος.

Οι παραπάνω εργασίες πυροδότησαν μια έκρηξη ερευνητικής δραστηριότητας στον τομέα των σύνθετων ΗΜ υλικών. Τέτοιου είδους υλικά, των οποίων οι ιδιότητες διαφέρουν από τις ιδιότητες των συστατικών τους στοιχείων, αποκαλούνται *μεταϊλικά*. Σήμερα βέβαια, λόγω της τεράστιας ανάπτυξης που γνώρισε ο κλάδος τα τελευταία δέκα χρόνια, ο όρος αυτός αναφέρεται κατά κύριο λόγο σε σύνθετα συστήματα που παρουσιάζουν νέες προοπτικές ελέγχου των ΗΜ και σε μικρότερο βαθμό των ακουστικών [8–11] - κυμάτων. Τα βασικά χαρακτηριστικά των ΗΜ μεταϊλικών είναι η αρνητική γωνία διάθλασης, η αντίθετη στη ροή ενέργειας φασική ταχύτητα, και το γεγονός ότι το ηλεκτρικό πεδίο, \mathbf{E} , το μαγνητικό πεδίο, \mathbf{H} , και το κυματόνυσμα, \mathbf{q} , συνιστούν ένα αριστερόστροφο σύστημα [12]. Γι' αυτό και χρησιμοποιούνται συχνά στη βιβλιογραφία οι όροι *υλικά αρνητικού δείκτη διάθλασης* και *αριστερόστροφα υλικά*.

Όπως είπαμε, το βασικό πρόβλημα που πρέπει να αντιμετωπιστεί για τον σχεδιασμό μεταϊλικών αρνητικού δείκτη διάθλασης είναι η εύρεση υλικών με αρνητική μαγνητική διαπε-

ρατότητα, ειδικά στην περιοχή του οπτικού φάσματος όπου η μαγνητική διαπερατότητα είναι πρακτικά μονάδα. Αυτό καθιστά την αναζήτηση τεχνητού οπτικού μαγνητισμού το θεμελιώδες πρόβλημα στον κλάδο των οπτικών μεταύλικών. Εκτός από τους ανοιχτούς δακτυλίους που αναφέραμε [4, 13–17], άλλες δομές που παρέχουν τεχνητό μαγνητισμό είναι τα ζεύγη κομμένων συρμάτων [18, 19], μεταλλικά σύρματα [20, 21], συζευγμένες μεταλλικές λωρίδες [22–25], και τα μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς [26–30]. Η εμφάνιση τεχνητού μαγνητισμού σε τέτοιες δομές οφείλεται στη δημιουργία ενός βρόχου ηλεκτρικού ρεύματος, ο οποίος οδηγεί σε μαγνητικό συντονισμό. Στις οπτικές συχνότητες ο βρόχος αυτός οφείλεται στη διέγερση *πλασματικών καταστάσεων*, δηλαδή συλλογικών ταλαντώσεων των ελεύθερων ηλεκτρονίων του μετάλλου [31]. Εναλλακτικά, τα τελευταία χρόνια έχειδειχθεί ότι δομές που περιέχουν στοιχεία υψηλής διηλεκτρικής συνάρτησης, όπως τα πολαριτονικά υλικά, οδηγούν σε αρνητική μαγνητική διαπερατότητα στο υπέρυθρο [32–34].

Απαραίτητη προϋπόθεση για μια περιγραφή με όρους ισοδύναμου ομοιογενούς μέσου, δηλαδή για μια επιτυχή *ομοιογενοποίηση* του σύνθετου μέσου, είναι να βρισκόμαστε στο λεγόμενο όριο του μεγάλου μήκους κύματος, δηλαδή το μήκος κύματος της ΗΜ ακτινοβολίας να είναι πολύ μεγαλύτερο τόσο από τις διαστάσεις των δομικών μονάδων του σύνθετου μέσου όσο και από τις μεταξύ τους αποστάσεις. Πέρα από το θεωρητικό ενδιαφέρον που παρουσιάζει η περιγραφή ενός μεταύλικού με όρους ισοδύναμου ομοιογενούς μέσου, οι μέθοδοι ομοιογενοποίησης έχουν μεγάλη πρακτική αξία, διότι διευκολύνουν τον σχεδιασμό νέων, συνθετότερων δομών. Επιλύοντας κανείς, με οποιαδήποτε αξιόπιστη τέτοια μέθοδο, το πρόβλημα της αλληλεπίδρασης της ΗΜ ακτινοβολίας με ένα απλό, συνήθως επίπεδο πλακίδιο του μεταύλικού, λαμβάνει ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους που μπορούν να χρησιμοποιηθούν περαιτέρω, σε σύνθετες δομές όπου το ομοιογενοποιημένο μέσο μπορεί για παράδειγμα να είναι καμπυλωμένο, ή να αποτελεί ένα μόνο από τα επιμέρους συστατικά της δομής. Διάφορες μέθοδοι ομοιογενοποίησης φωτονικών δομών έχουν προταθεί τα τελευταία χρόνια [35–41], αλλά αναμφίβολα οι δημοφιλέστερες είναι οι απλές μέθοδοι Maxwell - Garnett [42] και Bruggeman [43], καθώς και η μέθοδος ομοιογενοποίησης μέσω του πίνακα σχέδασης \mathbf{S} , ή μέθοδος αντίστροφης σχέδασης [44–47].

Έχοντας πλέον στη διάθεσή τους δομές που μπορούν να δώσουν τεχνητό μαγνητισμό, και θεωρητικές μεθόδους για την περιγραφή της συμπεριφοράς αυτών των δομών με όρους ισοδύναμου μέσου, πολλές ομάδες προχώρησαν στον σχεδιασμό και την παρασκευή υλικών που εμφανίζουν αρνητική διάθλαση [48–50], με εξέχουσα τη δομή διχτυών [51], η οποία προς το παρόν είναι και η πιο υποσχόμενη για την παρασκευή πραγματικά τρισδιάστατων (3D) μεταύλικών [52]. Παράλληλα, προτείνονται συνεχώς νέες, εντυπωσιακές εφαρμογές: τα ΗΜ μεταύλικά αποτελούν τα βασικά συστατικά στον νέο τομέα της οπτικής μετασχηματισμών [53, 54], κύριο αποτέλεσμα της οποίας είναι τα μέσα οπτικής απόκρυψης [55, 56], μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσανατολισμό της ΗΜ ακτινοβολίας [57], ως τέλεια απορροφούντα μέσα [58], ως κυκλικοί πολωτές [59], ως μέσα που εμφανίζουν ηλεκτρομαγνητικά επαγόμενη διαφάνεια [60], και βέβαια, όπως αναφέραμε, ως υπερφακοί [61–65]. Υπερφακούς μπορεί να πάρει κανείς και χωρίς το μέσο να χαρακτηρίζεται από αρνητική διηλεκτρική συνάρτηση και μαγνητική διαπερατότητα ταυτόχρονα, αξιοποιώντας για παράδειγμα την υπερβολική σχέση διασποράς ενός ανισοτροπικού μέσου [66, 67], ενώ αρνητική διάθλαση και εστίαση μπορούν να δώσουν και πιο παραδοσιακά μέσα, όπως οι *φωτονικοί κρύσταλλοι* [68–71].

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι είναι υλικά που βασίζονται σε περιοδική επανάληψη της διηλε-

κτρικής συνάρτησης στον χώρο. Κατ' αναλογία με τους ημιαγωγούς και μονωτές, στους οποίους η περιοδική επανάληψη του δυναμικού οδηγεί σε ενεργειακά χάσματα στις καταστάσεις ηλεκτρονίων, η περιοδική επανάληψη της διηλεκτρικής συνάρτησης οδηγεί σε χάσματα συχνοτήτων του ΗΜ πεδίου [72, 73]. Η βασική διαφορά των φωτονικών κρυστάλλων από τα μεταύλικά έχει να κάνει με τις διαστάσεις των δομικών τους μονάδων και τις αποστάσεις μεταξύ τους: ενώ για να χαρακτηριστεί μια δομή ως μεταύλικό είναι απαραίτητο να ισχύει το όριο του μεγάλου μήκους κύματος, σε έναν φωτονικό κρύσταλλο οι σχετικές διαστάσεις είναι συγκρίσιμες με το μήκος κύματος. Κατά τ' άλλα, πολλά από τα χαρακτηριστικά των δύο δομών είναι κοινά, γι' αυτό και στη θεωρητική μελέτη των μεταύλικών χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο οι μέθοδοι που είχαν αναπτυχθεί για τους φωτονικούς κρυστάλλους. Τέτοιες είναι η μέθοδος επιπέδων κυμάτων [74], η μέθοδος διακριτοποίησης των εξισώσεων του Maxwell στο πεδίο του χρόνου [75] ή των συχνοτήτων [76, 77], η μέθοδος πολλαπλής σκέδασης [78] και η μέθοδος διακριτών διπόλων [79]. Μια μέθοδος που διαθέτει τα πλεονεκτήματα των μεθόδων πολλαπλής σκέδασης, χωρίς όμως να βασίζεται στην υπολογιστικά χρονοβόρα ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα, είναι η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης [80–82].

Στην παρούσα διατριβή χρησιμοποιούμε και επεκτείνουμε κατάλληλα τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης για τη μελέτη της οπτικής απόκρισης σύνθετων περιοδικών ΗΜ δομών (μεταύλικών και φωτονικών κρυστάλλων) που λειτουργούν στην περιοχή του ορατού και υπερύθρου. Στο Κεφ. 1 συνοψίζουμε τα βασικά στοιχεία της ΗΜ θεωρίας που θα χρησιμοποιηθούν στην υπόλοιπη διατριβή. Παρουσιάζουμε μερικές βασικές διαφορές που προκύπτουν για υλικά αρνητικής διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας και δίνουμε ιδιαίτερη έμφαση στην ανάλυση ανισοτροπικών υλικών. Στο Κεφ. 2 παρουσιάζουμε τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, στην οποία προσθέτουμε τη δυνατότητα συνυπολογισμού μη τοπικών φαινομένων στην οπτική απόκριση των μεμονωμένων σχεδαστών και τον υπολογισμό ιδιοτήτων (συντελεστής ανάκλασης, εμπέδηση, επιφανειακές καταστάσεις) που σχετίζονται με τη διεπιφάνεια δύο ημιάπειρων ΗΜ μέσων, ενός ομοιογενούς και ενός περιοδικά δομημένου. Επιπλέον, εισάγουμε μια ανάλυση της διαθλαστικής συμπεριφοράς ενός κρυστάλλου που βασίζεται στις επιφάνειες σταθερής συχνότητας. Στο Κεφ. 3 παρουσιάζουμε δύο ιδιαίτερα διαδεδομένες μεθόδους ομοιογενοποίησης σύνθετων ΗΜ συστημάτων, τη μέθοδο Maxwell-Garnett και τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης (ομοιογενοποίηση μέσω του πίνακα σκέδασης), τις οποίες προσαρμόζουμε στις ανάγκες των εφαρμογών που θα μας απασχολήσουν, ενώ προτείνουμε τρόπους αντιμετώπισης γνωστών προβλημάτων που αυτές παρουσιάζουν. Παράλληλα προτείνουμε μια νέα, γενικότερη μέθοδο ομοιογενοποίησης που παρέχει αυστηρά εσωτερικά κριτήρια για τον έλεγχο της ακρίβειας των αποτελεσμάτων. Στα Κεφ. 4 - 6 αξιοποιούμε τα παραπάνω εργαλεία για τη μελέτη νανοδομημένων πλασμονικών συστημάτων, με δομικές μονάδες μεταλλικούς νανοφλοιούς, μεταλλικούς νανοκυλίνδρους, και μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς, αντίστοιχα. Για όλα τα συστήματα εξετάζουμε την οπτική τους απόκριση, που κυριαρχείται από τη διέγερση πλασμονικών καταστάσεων, καθώς και τη δυνατότητα ομοιογενοποίησής τους με τις μεθόδους του Κεφ. 3 και την εμφάνιση αρνητικής διάθλασης. Επιπλέον, στο Κεφ. 4 αναφέρουμε για πρώτη φορά την εμφάνιση επιφανειακών φωτονικών καταστάσεων σε πλασμονικούς κρυστάλλους, ενώ στο Κεφ. 5 εξετάζουμε τη δυνατότητα σχεδιασμού κυματοδηγών μεταλλικών νανοκυλίνδρων, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των ακριβών αριθμητικών υπολογισμών με ένα διαδεδομένο μοντέλο αλληλεπιδρόντων διπόλων. Τέλος, αναπτύσσουμε έναν φορμαλισμό για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης ενός

σημειακού διπόλου με περιοδικά δομημένο περιβάλλον και παρουσιάζουμε κάποια πρώτα αποτελέσματα για την αλληλεπίδραση του σημειακού διπόλου τόσο με περιοδικά νανοδομημένο μεταλλοδιηλεκτρικό περιβάλλον όσο και με μεμονωμένο μεταλλικό σωματίδιο.

Κεφάλαιο 1

Στοιχεία ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας

1.1 Οι εξισώσεις του Maxwell στην ύλη

Το ΗΜ πεδίο περιγράφεται κλασικά από τις εξισώσεις του Maxwell στην ύλη, οι οποίες, στο σύστημα μονάδων SI, γράφονται [83]

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

όπου \mathbf{D} είναι η ηλεκτρική μετατόπιση, \mathbf{E} το ηλεκτρικό πεδίο, \mathbf{B} η μαγνητική επαγωγή, \mathbf{H} το μαγνητικό πεδίο, ρ η πυκνότητα (ελεύθερου) φορτίου, και \mathbf{j} η πυκνότητα (ελεύθερου) ρεύματος. Η ηλεκτρική μετατόπιση και η μαγνητική επαγωγή συνδέονται με το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο μέσω *καταστατικών εξισώσεων*, οι οποίες είναι χαρακτηριστικές του κάθε συστήματος, Εν γένει ισχύει

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{D}[\mathbf{E}, \mathbf{B}] \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}[\mathbf{E}, \mathbf{B}]. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Οι αγκύλες δηλώνουν ότι οι συσχετίσεις μπορεί να είναι σύνθετες και να εξαρτώνται, για παράδειγμα, από την προηγούμενη ιστορία του υλικού (υστέρηση) ή να είναι μη γραμμικές. Ωστόσο, στις περιπτώσεις που θα μας απασχολήσουν μόνο η ηλεκτρική και μαγνητική πόλωση του υλικού, \mathbf{P} και \mathbf{M} , αντίστοιχα, είναι σημαντικές. Έτσι, οι Εξ. (1.2) παίρνουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \\ \mathbf{H} &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

όπου ε_0 είναι η ηλεκτρική επιδεκτικότητα και μ_0 η μαγνητική διαπερατότητα στο κενό. Στις Εξ. (1.3) η ηλεκτρική και μαγνητική πόλωση εξαρτώνται από το υλικό και τα εξωτερικά πεδία. Αν θεωρήσουμε ότι οι εξαρτήσεις αυτές είναι γραμμικές, τότε για ένα *ανισοτροπικό* μέσο έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \varepsilon_0 \int_V d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \overleftrightarrow{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}', t') \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \int_V d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \overleftrightarrow{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}', t'), \end{aligned} \quad (1.4)$$

όπου η χωρική ολοκλήρωση γίνεται σε όλο τον όγκο, V , του υλικού. Η σχετική διηλεκτρική συνάρτηση, $\overleftarrow{\epsilon}$, και η σχετική μαγνητική διαπερατότητα, $\overleftarrow{\mu}$, είναι οι συναρτήσεις απόκρισης του υλικού, εν γένει ταυιστές δεύτερης τάξης που συνδέουν την ηλεκτρική μετατόπιση και τη μαγνητική επαγωγή με το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο, αντίστοιχα. Λόγω της χρονικής ομοιογένειας προκύπτει

$$\begin{aligned}\overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \\ \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') .\end{aligned}\quad (1.5)$$

Σημειώνουμε ότι, λόγω της αρχής της αιτιότητας, $\overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = 0$ για $t < t'$. Αν επιπλέον θεωρήσουμε την τοπικότητα των πεδίων, 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

$$\begin{aligned}\overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') .\end{aligned}\quad (1.6)$$

Τέλος, θεωρώντας ότι το μέσο είναι *ισοτροπικό*, οι ταυιστές που ορίστηκαν στην Εξ. (1.4) μεταπίπτουν σε βαθμωτά μεγέθη

$$\begin{aligned}\overleftarrow{\epsilon}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \epsilon(\mathbf{r}, t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \overleftarrow{\mu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \mu(\mathbf{r}, t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') .\end{aligned}\quad (1.7)$$

Από την Εξ. (1.4), μέσω της Εξ. (1.7), προκύπτει

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \epsilon(\mathbf{r}, t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \mu(\mathbf{r}, t - t') \mathbf{H}(\mathbf{r}, t') .\end{aligned}\quad (1.8)$$

Εφαρμόζοντας στην παραπάνω εξίσωση τον μετασχηματισμό Fourier $[\int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) \dots]$ προκύπτει

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r}; \omega) &= \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}; \omega) &= \mu_0 \mu(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}; \omega) ,\end{aligned}\quad (1.9)$$

όπου

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\mathbf{r}; \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(i\omega t) \mathbf{F}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{F} = \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{E}, \mathbf{H} \\ f(\mathbf{r}; \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) f(\mathbf{r}, t), \quad f = \epsilon, \mu .\end{aligned}\quad (1.10)$$

Σημειώνουμε ότι ενώ τα μετασχηματισμένα πεδία και οι αντίστοιχες μετασχηματισμένες συναρτήσεις απόκρισης είναι μιγαδικές ποσότητες, τα χωροχρονικά πεδία και οι αντίστοιχες συναρτήσεις απόκρισης είναι πραγματικοί αριθμοί. Αυτό επιβάλλει τους περιορισμούς

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\mathbf{r}; -\omega) &= \mathbf{F}^*(\mathbf{r}; \omega), \quad \mathbf{F} = \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{E}, \mathbf{H} \\ f(\mathbf{r}; -\omega) &= f^*(\mathbf{r}; \omega), \quad f = \epsilon, \mu ,\end{aligned}\quad (1.11)$$

όπου το σύμβολο * δηλώνει μιγαδική συζυγία. Λόγω της γραμμικότητας των εξισώσεων του Maxwell, όπως προκύπτει από τις Εξ. (1.1), 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

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \text{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)] \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \text{Re}[\mathbf{H}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)] .\end{aligned}\quad (1.12)$$

Οι αντίστοιχες μετασχηματισμένες εξισώσεις Maxwell για περιοχές του χώρου χωρίς ελεύθερα φορτία και ρεύματα γράφονται

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r})] &= 0 & \nabla \cdot [\mu(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{H}(\mathbf{r})] &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= i\omega\mu_0\mu(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}) & \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}) ,\end{aligned}\quad (1.13)$$

όπου για ευκολία έχουμε παραλείψει την εξάρτηση των παραπάνω πεδίων από τη συχνότητα. Εύκολα βλέπουμε ότι οι δύο πρώτες των Εξ. (1.13) προκύπτουν από τις δύο τελευταίες με εφαρμογή του τελεστή $\nabla \cdot$. Συνεπώς, οι μετασχηματισμένες κατά Fourier εξισώσεις του Maxwell συνοψίζονται στις

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\omega\mu_0\mu(\mathbf{r}; \omega)} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r}; \omega)} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}; \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}) ,\end{aligned}\quad (1.14)$$

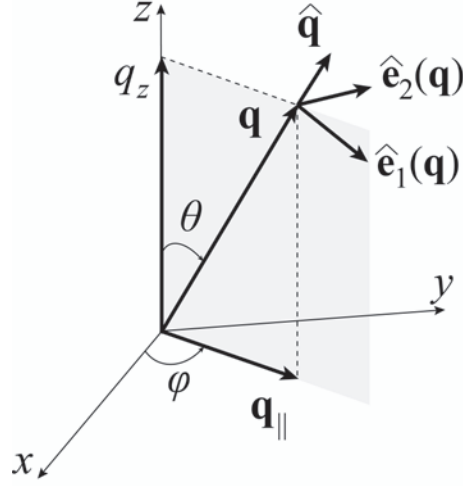
όπου $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ η ταχύτητα του φωτός στο κενό. Η δεύτερη των Εξ. (1.14) αποτελεί την εξίσωση κύματος για το χωρικό κομμάτι του ηλεκτρικού πεδίου. Αν στις παραπάνω εξισώσεις εναλλάξουμε τις θέσεις του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου, και τις θέσεις της διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας, προκύπτει η αντίστοιχη εξίσωση κύματος για το χωρικό κομμάτι του μαγνητικού πεδίου. Αν επιπλέον θεωρήσουμε ένα ομοιογενές και ισότροπο μέσο, στο οποίο η διηλεκτρική συνάρτηση και η μαγνητική διαπερατότητα είναι ανεξάρτητες του \mathbf{r} , η κυματική εξίσωση (1.14) γράφεται

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon \mu \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 , \quad (1.15)$$

όπου λάβαμε υπόψη την ταυτότητα (Α'.6) του Παραρτήματος Α' και την πρώτη των Εξ. (1.13) όπως διαμορφώνεται σε αυτή την περίπτωση, $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$. Ένα πλήρες σύνολο λύσεων της Εξ. (1.15) αποτελούν τα επίπεδα κύματα

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) , \quad (1.16)$$

με $\mathbf{E}_0(\mathbf{q}) = E_0(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$, όπου τα $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$, $\mathbf{p} = 0, 1, 2$ συμβολίζουν το ακτινικό, πολικό και αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, αντίστοιχα, για ένα δεδομένο κυματόνυσμα \mathbf{q} , και καθορίζουν την πόλωση (Σχ. 1.1). Σημειώνεται ότι το διάμηκες κύμα $\hat{\mathbf{e}}_0(\mathbf{q}) = \hat{\mathbf{q}}$ αποτελεί λύση μόνο αν $\omega = 0$, ή αν $\varepsilon\mu = 0$, και επομένως δεν συνιστά οδεύον κύμα. Για τις εγκάρσιες λύσεις προκύπτει άμεσα ότι $q = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}/c$. Σημειώνουμε ότι, μολονότι οι τετριμμένες διαμήκεις λύσεις



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

δεν υπεισέρχονται στην έκφραση ενός (εγκάρσιου) HM κύματος δεδομένης συχνότητας $\omega \neq 0$, αποτελούν ουσιώδεις μαθηματικές λύσεις της κυματικής εξίσωσης.

Η αρχή διατήρησης της ενέργειας για HM πεδία απαιτεί ο ρυθμός μεταβολής της HM ενέργειας σε δεδομένο όγκο συν τον ρυθμό ροής ενέργειας από την επιφάνεια που περικλείει αυτό τον όγκο να αντισταθμίζεται από το έργο του πεδίου μέσα στον δεδομένο όγκο. Αν έχουμε μια κατανομή φορτίων και ρευμάτων, ο ρυθμός παραγωγής έργου από το HM πεδίο ανά μονάδα όγκου είναι $\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}$. Από την τελευταία των Εξ. (1.1) έχουμε

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) - \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (1.17)$$

Χρησιμοποιώντας τη διανυσματική ταυτότητα (Α'10) και την τρίτη των Εξ. (1.1), η Εξ. (1.17) γράφεται

$$-\mathbf{E} \cdot \mathbf{j} = \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{\partial U}{\partial t}, \quad (1.18)$$

όπου $\mathbf{S} \equiv \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ και $U \equiv [\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}]/2$. Το βαθμωτό μέγεθος U συμβολίζει την πυκνότητα ενέργειας (ανά μονάδα όγκου) του HM πεδίου. Το διάνυσμα \mathbf{S} λέγεται διάνυσμα Poynting και παριστά τη ροή ενέργειας (ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας ανά μονάδα χρόνου) κατά τη διεύθυνσή του. Επομένως, η ποσότητα $\nabla \cdot \mathbf{S}$ δίνει την HM ισχύ που εκρέει από τη μονάδα όγκου. Η Εξ. (1.18) είναι γνωστή ως εξίσωση της συνέχειας ή διατήρησης της ενέργειας (θεώρημα Poynting).

Η ταχύτητα διάδοσης των HM κυμάτων εξαρτάται, εν γένει, από τη συχνότητα· ένα μέσο στο οποίο συμβαίνει αυτό λέμε ότι εμφανίζει διασπορά. Στην πραγματικότητα, όλα τα μέσα παρουσιάζουν διασπορά, και μόνο σε περιορισμένο εύρος συχνοτήτων (ή στο κενό) μπορεί η ταχύτητα διάδοσης του κύματος να θεωρηθεί σταθερή. Επειδή κύματα διαφορετικών συχνοτήτων διαδίδονται με διαφορετικές ταχύτητες σε ένα μέσο που παρουσιάζει διασπορά, μια

κυματομορφή που προκύπτει ως αποτέλεσμα επαλληλίας κυμάτων διαφορετικών συχνοτήτων αλλάζει σχήμα καθώς διαδίδεται στο μέσο. Η κάθε συνιστώσα έχει τη δική της φασική ταχύτητα, ενώ όλο το κυματοπακέτο κινείται με την ταχύτητα ομάδος. Παρακάτω θα αναπτύξουμε τις δύο αυτές ταχύτητες σε ένα απλό μονοδιάστατο παράδειγμα.

Ας θεωρήσουμε ένα ΗΜ κύμα δεδομένης συχνότητας ω , το οποίο διαδίδεται κατά τη διεύθυνση z : $\mathbf{E}(z, t) = E_0 \exp(i[qz - \omega t])\hat{x} = E_x(z, t)\hat{x}$. Η ταχύτητα διάδοσης της επιφάνειας που ορίζεται από τη σχέση $qz - \omega t = \text{σταθ.}$ (ισοφασική επιφάνεια) προκύπτει από την παράγωγο της θέσης ως προς τον χρόνο

$$v_p = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{q}. \quad (1.19)$$

Η ταχύτητα αυτή καλείται ταχύτητα φάσης. Σε ένα μέσο με διασπορά η ταχύτητα φάσης είναι διαφορετική για κάθε συχνότητα λόγω της εξάρτησης $\omega = \omega(q)$. Η γενική λύση γράφεται

$$E_x(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq A(q) e^{i[qz - \omega(q)t]}, \quad (1.20)$$

όπου το πλάτος $A(q)$ περιγράφει τις ιδιότητες της υπέρθεσης των διαφορετικών κυμάτων και δίνεται από τη σχέση

$$A(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz E_x(z, 0) e^{-iqz}. \quad (1.21)$$

Η μορφή της συνάρτησης $E_x(z, 0)$ καθορίζει τη μορφή της $A(q)$, και αυτή με τη σειρά της καθορίζει τη μορφή της $E_x(z, t)$. Αν θεωρήσουμε αρχικά ότι $E_x(z, 0) = \exp(iq_0 z)$, τότε θα έχουμε $A(q) = \sqrt{2\pi} \delta(q - q_0)$ και $E_x(z, t) = \exp(i[q_0 z - \omega(q_0)t])$. Άρα, όταν η $E_x(z, t)$ παριστά ένα επίπεδο κύμα συγκεκριμένου κυματάριθμου q_0 , η $E_x(z, t)$ παριστά επίσης ένα επίπεδο κύμα, το οποίο εξελίσσεται χρονικά σύμφωνα με τον φασικό παράγοντα $\exp(-i\omega(q_0)t)$. Αν τώρα η $E_x(z, 0)$ παριστά ένα κυματοπακέτο εύρους Δz , η συνάρτηση $A(q)$ δεν θα είναι πλέον μια συνάρτηση δέλτα αλλά θα έχει ένα εύρος Δq γύρω από τον κυματάριθμο q_0 .

Καθώς το κυματοπακέτο κινείται, οι συνιστώσες διαφορετικού κυματάριθμου κινούνται με διαφορετική ταχύτητα φάσης, συνεπώς το κυματοπακέτο τείνει να αλλάξει τη μορφή του. Αν θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα κυματοπακέτο με μικρό εύρος κυματάριθμων, μπορούμε να αναπτύξουμε τη συχνότητα κατά Taylor γύρω από τον κεντρικό κυματάριθμο

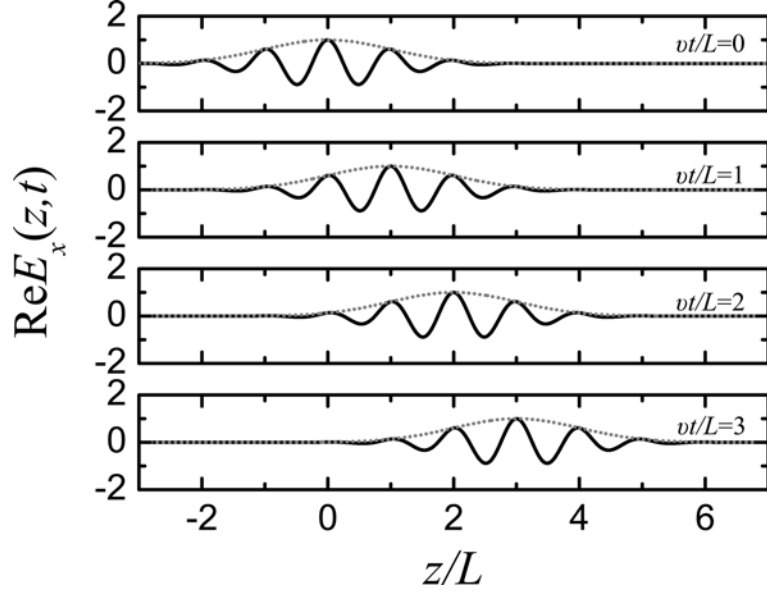
$$\omega(q) = \omega(q_0) + \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} (q - q_0) + \dots, \quad (1.22)$$

όπου κρατήσαμε όρους μέχρι πρώτης τάξης. Τότε η Εξ. (1.20) γράφεται

$$E_x(z, t) \approx \frac{e^{i\left[q_0 \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} - \omega(q_0)\right]t}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq A(q) e^{i\left(z - \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} t\right)q}. \quad (1.23)$$

Με την αλλαγή μεταβλητής $z' = z - \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} t$ φαίνεται, συγκρίνοντας με την Εξ. (1.20) για $t = 0$, ότι το ολοκλήρωμα στην Εξ. (1.23) είναι ίσο με $E_x(z', 0)$. Άρα η Εξ. (1.23) γράφεται

$$E_x(z, t) \approx E_x\left(z - \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} t, 0\right) e^{i\left[q_0 \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0} - \omega(q_0)\right]t}. \quad (1.24)$$



Σχήμα 1.2: Διάδοση ενός παλμού με σταθερή ταχύτητα ομάδος.

Από την τελευταία φαίνεται ότι ο παλμός κινείται χωρίς να αλλάζει η μορφή του, με ταχύτητα η οποία καλείται ταχύτητα ομάδος,

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dq} \right|_{q_0}. \quad (1.25)$$

Για να γίνει καλύτερα κατανοητός ο ορισμός της ταχύτητας ομάδος θα εξετάσουμε την απλή περίπτωση ενός μέσου με γραμμική σχέση διασποράς, $\omega(q) = vq$, οπότε $v_{ph} = v_g = v$. Θεωρώντας ένα αρχικό γκαουσιανό κυματοπακέτο της μορφής $E_x(z, 0) = \exp(-[z^2/2L^2] + iq_0z)$, όπου το εύρος της γκαουσιανής είναι της τάξης του L , μέσω της Εξ. (1.21) το πλάτος $A(q)$ γράφεται

$$A(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-[(z^2/2L^2) + i(q-q_0)z]} = L e^{-[(q-q_0)^2 L^2/2]}, \quad (1.26)$$

οπότε η χρονική εξέλιξη του παλμού, βάσει της Εξ. (1.20), είναι

$$E_x(z, t) = \frac{L}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-[(q-q_0)^2 L^2/2]} e^{iq(z-vt)} = e^{-[(vt-z)^2/2L^2]} e^{iq_0(vt-z)}. \quad (1.27)$$

Από τις Εξ. (1.26) και (1.27) είναι φανερό ότι για ένα κυματοπακέτο εύρους Δz με πλάτος Δq θα ισχύει $\Delta z \Delta q = 8 \ln 2$. Το πραγματικό μέρος της $E_x(z, t)$ είναι βολικό να γραφεί στη μορφή

$$\text{Re}E_x(z, t) = e^{-(1/2)[(vt/L) - (z/L)]^2} \cos(q_0 L [\frac{vt}{L} - \frac{z}{L}]) \quad (1.28)$$

και παρουσιάζεται, για $q_0 L = 2\pi$, στο Σχ. 1.2 για στιγμιότυπα που αντιστοιχούν σε $vt/L = 0, 1, 2, 3$. Είναι φανερό ότι ο παλμός διαδίδεται με σταθερή ταχύτητα ομάδος, $(z/L)/(vt/L) = 1 \Rightarrow z/t = v$.

Θεωρώντας ένα επίπεδο κύμα της μορφής (1.16), από τις εξισώσεις του Maxwell, Εξ. (1.14), προκύπτει ότι τα \mathbf{q} , \mathbf{E} και \mathbf{H} σχετίζονται μέσω των

$$\begin{aligned}\mathbf{q} \times \mathbf{E} &= \mu_0 \mu(\omega) \omega \mathbf{H} \\ \mathbf{q} \times \mathbf{H} &= -\varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \omega \mathbf{E} .\end{aligned}\quad (1.29)$$

Για ένα συνηθισμένο μέσο, με $\varepsilon(\omega) > 0$ και $\mu(\omega) > 0$, οι Εξ. (1.29) δείχνουν ότι τα \mathbf{q} , \mathbf{E} και \mathbf{H} αποτελούν ένα δεξιόστροφο σύστημα. Στην περίπτωση όμως που $\varepsilon < 0$ και $\mu < 0$, τα \mathbf{q} , \mathbf{E} και \mathbf{H} αποτελούν ένα αριστερόστροφο σύστημα, και το υλικό χαρακτηρίζεται ως *αριστερόστροφο υλικό*.¹ Κατά τη διάδοση ενός ΗΜ κύματος σε αριστερόστροφο υλικό, το κυματόνισμα (ή, για περισσότερη ακρίβεια, η κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ ενός αριστερόστροφου και ενός δεξιόστροφου υλικού συνιστώσα του) έχει αντίθετη φορά από αυτή σε ένα δεξιόστροφο. Από την άλλη, το διάνυσμα Poynting, από τον ορισμό του, $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$, σχηματίζει πάντα ένα δεξιόστροφο σύστημα με τα \mathbf{E} και \mathbf{H} . Συνεπώς, σε ένα αριστερόστροφο υλικό τα διανύσματα \mathbf{S} και \mathbf{q} είναι αντιπαράλληλα. Αυτό σημαίνει ότι η ταχύτητα φάσης, που εξ ορισμού έχει τη διεύθυνση του κυματόνισματος, είναι αντιπαράλληλη με το διάνυσμα Poynting, και άρα αντιπαράλληλη με την ταχύτητα ομάδος.

1.2 Η διεπιφάνεια μεταξύ δύο ομοιογενών μέσων

Ας θεωρήσουμε τώρα τη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο ημιάπειρων ομοιογενών μέσων, '1' και '2', έστω στο επίπεδο $x - y$, τα οποία περιγράφονται από τοπικές συναρτήσεις απόκλισης, $\varepsilon_1(\omega)$, $\mu_1(\omega)$ και $\varepsilon_2(\omega)$, $\mu_2(\omega)$, αντίστοιχα. Θα θεωρήσουμε ένα επίπεδο κύμα που διαδίδεται από το μέσο '1', το οποίο είναι ομοιογενές και ισότροπο, προς το μέσο '2', που μπορεί να είναι ανισοτροπικό, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 1.3.

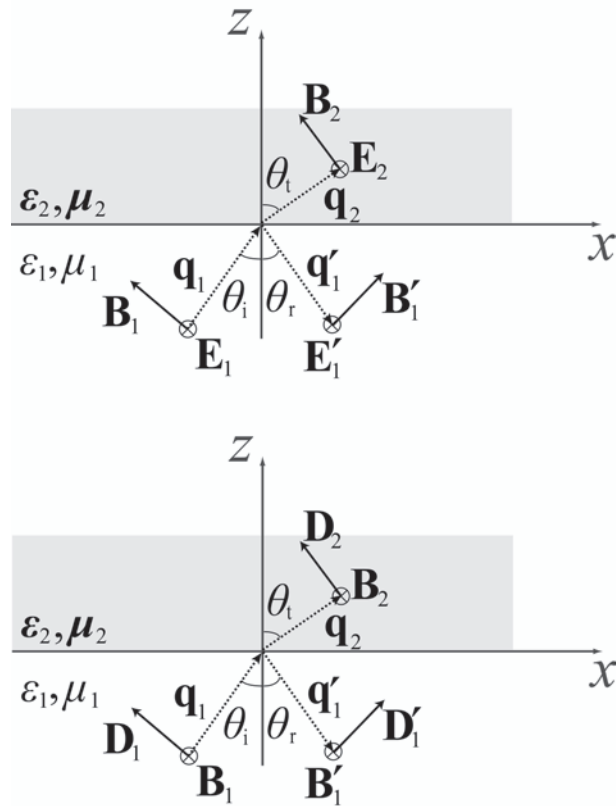
Αρχικά θα υποθέσουμε ότι και τα δύο μέσα είναι ισότροπα. Σε ένα ομοιογενές και ισότροπο μέσο μπορεί να αναπτύξει κανείς την Εξ. (1.15) σε συνιστώσες ($m = x, y, z$), κάθε μία από τις οποίες αποτελεί μια διαφορική εξίσωση Helmholtz

$$\frac{\partial^2 E_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_m}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_m}{\partial z^2} + \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon \mu E_m = 0 ,$$

που επιδέχεται λύσεις της μορφής $\exp(iqz)$, όπου $q^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon \mu$ είναι ο κυματάρηθος. Τότε η φασική ταχύτητα γράφεται $v_p = \omega/q = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon \mu} \equiv c/n$, όπου n ορίζεται ο δείκτης διάθλασης, $n^2 \equiv \varepsilon \mu$. Στη διεπιφάνεια των μέσων '1' και '2', τα πεδία θα είναι

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_1 &= \mathbf{E}_{10} \exp(i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}) & \mathbf{B}_1 &= n_1 \frac{\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1}{q_1} \\ \mathbf{E}'_1 &= \mathbf{E}'_{10} \exp(i\mathbf{q}'_1 \cdot \mathbf{r}) & \mathbf{B}'_1 &= n_1 \frac{\mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1}{q_1} \\ \mathbf{E}_2 &= \mathbf{E}_{20} \exp(i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}) & \mathbf{B}_2 &= n_2 \frac{\mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2}{q_2} .\end{aligned}\quad (1.30)$$

¹Θα πρέπει να σημειώσουμε ότι ο χαρακτηρισμός ενός υλικού ως μέσο με $\varepsilon < 0$, $\mu < 0$ αποτελεί μια ευρέως διαδεδομένη στη βιβλιογραφία σύμβαση, που στην πραγματικότητα αναφέρεται στα πραγματικά μέρη των (εν γένει μιγαδικών) συναρτήσεων απόκλισης. Για ρεαλιστικά υλικά τα φανταστικά μέρη των ε και μ πρέπει να είναι πάντα θετικά, διότι διαφορετικά θα είχαμε ενίσχυση και όχι απόσβεση ενός κύματος στο υλικό.



Σχήμα 1.3: Ανάκλαση και διάθλαση στη διεπιφάνεια δύο ομοιογενών μέσων, για προσπίπτοντα κύματα πόλωσης TE (πάνω) και TM (κάτω).

Στις παραπάνω σχέσεις ο τόνος συμβολίζει ανακλώμενα κύματα, και \mathbf{E}_{j0} είναι το πλάτος του ηλεκτρικού πεδίου στο μέσο j . Η παρουσία διαχωριστικής επιφάνειας στη θέση $z = 0$ επιβάλλει να έχουν τα πεδία την ίδια χωρική και χρονική συμπεριφορά σε αυτή τη θέση. Επομένως

$$(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{q}'_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r})_{z=0} \Rightarrow q_1 \sin \theta_i = q'_1 \sin \theta_r = q_2 \sin \theta_t, \quad (1.31)$$

από όπου, δεδομένου ότι $q_1 = q'_1$ (κυματάρημοι που αναφέρονται στο ίδιο μέσο), παίρνουμε

$$\begin{aligned} \theta_i &= \theta_r \\ q_1 \sin \theta_i &= q_2 \sin \theta_t, \quad \text{ή,} \\ n_1 \sin \theta_i &= n_2 \sin \theta_t, \end{aligned} \quad (1.32)$$

που είναι ο νόμος του Snell για τη διάθλαση. Στην παραπάνω εξίσωση θ_i , θ_r , και θ_t είναι οι γωνίες πρόσπτωσης, ανάκλασης, και διάθλασης, αντίστοιχα. Στην περίπτωση που το μέσο '2' χαρακτηρίζεται από $\epsilon_2 < 0$ και $\mu_2 < 0$, το κυματάνυσμα θα πρέπει, όπως είπαμε, να έχει αντίθετη φορά από το διάνυσμα Poynting. Προφανώς κατά τη διέλευση από το μέσο '1' στο

μέσο '2' το διάνυσμα Poynting δεν μπορεί να αλλάξει φορά, γιατί αυτό έρχεται σε αντίθεση με την αιτιότητα, που απαιτεί η ροή ενέργειας να απομακρύνεται από την πηγή (την οποία έχουμε υποθέσει στο μέσο '1'). Επιπλέον, η παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος διατηρείται αφού το σύστημα μένει αναλλοίωτο σε μετατοπίσεις στο επίπεδο της διαχωριστικής επιφάνειας. Συνεπώς αυτό που αλλάζει στην παραπάνω ανάλυση (και στο Σχ. 1.3) είναι η φορά της κάθετης συνιστώσας του κυματανύσματος, από όπου προκύπτει ότι $-\pi/2 < \theta_t < 0$. Τότε, σύμφωνα με τον νόμο του Snell, αφού $\sin \theta_t < 0$, θα πρέπει να αποδώσουμε στο μέσο '2' αρνητικό δείκτη διάθλασης.

Στα παραπάνω θεωρήσαμε ότι η διηλεκτρική συνάρτηση και η μαγνητική διαπερατότητα είναι πραγματικές. Στις ρεαλιστικές περιπτώσεις όμως, οι συναρτήσεις απόκρισης είναι μιγαδικές ποσότητες, $\varepsilon = \text{Re}\varepsilon + i\text{Im}\varepsilon$ και $\mu = \text{Re}\mu + i\text{Im}\mu$, με τα φανταστικά τους μέρη να περιγράφουν τις ενεργειακές απώλειες. Επιπλέον, τα φανταστικά μέρη των ε και μ είναι πάντα θετικά, διότι διαφορετικά θα είχαμε ενίσχυση αντί εξασθένιση του κύματος. Όπως είδαμε, ο δείκτης διάθλασης ορίζεται από τη σχέση $n^2 = \varepsilon\mu$. Για να επιλέξουμε ποιά από τις δύο ρίζες, $n_{\pm} = \pm\sqrt{\varepsilon\mu}$, είναι η σωστή σε αυτή την περίπτωση, χρειάζεται να γράψουμε τον δείκτη διάθλασης σε τριγωνομετρική μορφή

$$n = \sqrt{|\varepsilon||\mu|} e^{i(\phi_\varepsilon + \phi_\mu)/2} \equiv |n| e^{i\phi_n}, \quad (1.33)$$

όπου $|\varepsilon|$, $|\mu|$ είναι τα μέτρα και ϕ_ε , ϕ_μ οι φάσεις των ε και μ , αντίστοιχα, ενώ ορίσαμε $|n| = \sqrt{|\varepsilon||\mu|}$ και $\phi_n = (\phi_\varepsilon + \phi_\mu)/2$. Διακρίνουμε τότε τις ακόλουθες περιπτώσεις:

1. Αν τα ε και μ βρίσκονται στο πρώτο τεταρτημόριο, δηλαδή τα πραγματικά τους μέρη είναι θετικά, έχουμε $0 \leq \phi_\varepsilon \leq \pi/2$ και $0 \leq \phi_\mu \leq \pi/2$, από όπου προκύπτει $0 \leq \phi_n \leq \pi/2$. Τότε ο δείκτης διάθλασης βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο, έχει θετικό πραγματικό μέρος, και επιλέγουμε τη θετική ρίζα.
2. Αν τα ε και μ βρίσκονται στο δεύτερο τεταρτημόριο, δηλαδή τα πραγματικά τους μέρη είναι αρνητικά, έχουμε $\pi/2 \leq \phi_\varepsilon \leq \pi$ και $\pi/2 \leq \phi_\mu \leq \pi$, από όπου προκύπτει $\pi/2 \leq \phi_n \leq \pi$. Τότε ο δείκτης διάθλασης βρίσκεται στο δεύτερο τεταρτημόριο, έχει αρνητικό πραγματικό μέρος, και επιλέγουμε την αρνητική ρίζα.
3. Αν ένα εκ των ε και μ βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο ενώ το άλλο στο δεύτερο, έστω $\pi/2 \leq \phi_\varepsilon \leq \pi$ και $0 \leq \phi_\mu \leq \pi/2$, τότε $\pi/4 \leq \phi_n \leq 3\pi/4$ και δεν μπορούμε να γνωρίζουμε το πρόσημο του δείκτη διάθλασης μόνο από τα πρόσημα των ε και μ .

Συνεπώς βλέπουμε ότι όταν $\varepsilon, \mu < 0$ ο δείκτης διάθλασης είναι αρνητικός, και επιπλέον, όπως αναφέραμε στο τέλος του Εδ. 1.1, οι ταχύτητες φάσης και ομάδος είναι αντίθετες. Επιπλέον, είναι εύκολο να αποδειχθεί ότι ισχύει και το αντίθετο, ότι δηλαδή η απαίτηση οι ταχύτητες φάσης και ομάδος να είναι αντίθετες σε ένα μέσο ικανοποιείται όταν

$$|\varepsilon| \text{Re}\mu + |\mu| \text{Re}\varepsilon < 0, \quad (1.34)$$

όταν δηλαδή τα πραγματικά μέρη των ε και μ είναι αρνητικά [84, 85].

Επιστρέφοντας στο πρόβλημα τις διεπιφάνειας, οι συνοριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται κατά τη διάδοση ενός επίπεδου κύματος από το μέσο '1' στο μέσο '2' είναι η

συνέχεια των κάθετων συνιστωσών των \mathbf{D} και \mathbf{B} , και η συνέχεια των εφαπτομενικών συνιστωσών των \mathbf{E} και \mathbf{H} . Λαμβάνοντας υπόψη τις κατασταστικές εξισώσεις $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ και $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$ οι συνοριακές συνθήκες γράφονται

$$\begin{aligned} & \left[\varepsilon_1 \mathbf{E}_1 + \varepsilon_1 \mathbf{E}'_1 - \varepsilon_2 \mathbf{E}_2 \right] \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0 \\ & \left[\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1 + \mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1 - \mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2 \right] \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0 \\ & \left[\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}'_1 - \mathbf{E}_2 \right] \times \hat{\mathbf{z}} = 0 \\ & \left[\frac{1}{\mu_1} (\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1) + \frac{1}{\mu_1} (\mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1) - \frac{1}{\mu_2} (\mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2) \right] \times \hat{\mathbf{z}} = 0 . \end{aligned} \quad (1.35)$$

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να ξεχωρίσουμε δύο περιπτώσεις, που αντιστοιχούν στις δύο βασικές πολώσεις: TE (Transverse Electric, εγκάρσια ηλεκτρική), όπου το ηλεκτρικό πεδίο είναι πολωμένο κάθετα στο επίπεδο πρόσπτωσης, και TM (Transverse Magnetic, εγκάρσια μαγνητική), όπου το μαγνητικό πεδίο είναι πολωμένο κάθετα στο επίπεδο πρόσπτωσης (το επίπεδο πρόσπτωσης ορίζεται από το κυματόνισμα και το κάθετο στη διεπιφάνεια μοναδιαίο διάνυσμα). Στην περίπτωση της πόλωσης TE οι συνιστώσες του κυματόνισματος και του ηλεκτρικού πεδίου είναι $\mathbf{q}_j = (q_j \sin \theta_j, 0, q_j \cos \theta_j)$ και $\mathbf{E}_j = (0, E_j, 0)$, αντίστοιχα. Αντικαθιστώντας τα διανύσματα \mathbf{q} και \mathbf{E} στις συνοριακές συνθήκες (1.35), και χρησιμοποιώντας τον νόμο του Snell, καταλήγουμε στη σχέση

$$\frac{q_1}{\mu_1} E_1 \cos \theta_i - \frac{q_2}{\mu_2} E_1 \cos \theta_t = \frac{q_1}{\mu_1} E'_1 \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} E'_1 \cos \theta_t = 0 , \quad (1.36)$$

μέσω της οποίας μπορούμε να ορίσουμε τον συντελεστή ανάκλασης

$$r_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E'_1}{E_1} = \frac{\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i - \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t}{\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t} = \frac{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} - \mu_1 q_{2(\text{TE})z}}{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}} , \quad (1.37)$$

και, δεδομένου ότι $E_2/E_1 = 1 + E'_1/E_1$, τον συντελεστή διέλευσης

$$t_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E_2}{E_1} = 1 + r_{12(\text{TE})} = \frac{2\mu_2 q_{1(\text{TE})z}}{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}} . \quad (1.38)$$

Παρόμοια, στην περίπτωση της πόλωσης TM τα πεδία γράφονται $\mathbf{q}_j = (q_j \sin \theta_j, 0, q_j \cos \theta_j)$, $\mathbf{B}_j = (0, B_j, 0)$, και $\mathbf{E}_j = E_j(-\cos \theta_j, 0, \sin \theta_j)$. Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες (1.35), και χρησιμοποιώντας τον νόμο του Snell, καταλήγουμε στη σχέση

$$E_1 (q_2 \mu_1 \cos \theta_i - q_1 \mu_2 \cos \theta_t) = E'_1 (q_1 \mu_2 \cos \theta_t + q_2 \mu_1 \cos \theta_i) , \quad (1.39)$$

από όπου παίρνουμε τον συντελεστή ανάκλασης

$$r_{12(\text{TM})} \equiv \frac{E'_1}{E_1} = \frac{q_2 \mu_1 \cos \theta_i - q_1 \mu_2 \cos \theta_t}{q_2 \mu_1 \cos \theta_i + q_1 \mu_2 \cos \theta_t} = \frac{\varepsilon_2 q_{1(\text{TM})z} - \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}}{\varepsilon_2 q_{1(\text{TM})z} + \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}} , \quad (1.40)$$

και τον συντελεστή διέλευσης

$$t_{12(\text{TM})} \equiv \frac{E_2}{E_1} = \frac{2q_1\mu_2 \cos \theta_i}{q_1\mu_2 \cos \theta_t + q_2\mu_1 \cos \theta_i} = 2 \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \sqrt{\varepsilon_2\mu_2} q_{1(\text{TM})z}}{\varepsilon_2 q_{1(\text{TM})z} + \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}}. \quad (1.41)$$

Σημειώνουμε ότι για κάθετη πρόσπτωση ($\theta_i = \theta_r = \theta_t = 0$) οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης είναι ίδιοι και για τις δύο πολώσεις, εκτός από μία διαφορά προσήμου στους συντελεστές ανάκλασης. Η διαφορά αυτή οφείλεται στο ότι στην περίπτωση της πόλωσης TM οι παράλληλες στη διεπιφάνεια συνιστώσες του προσπίπτοντος και ανακλώμενου ηλεκτρικού πεδίου έχουν αντίθετες φορές.

Για τον υπολογισμό των συντελεστών ανάκλασης και διέλευσης από ένα πεπερασμένο ομοιογενές και ισότροπο πλακίδιο, πάχους h , που περιγράφεται από διηλεκτρική συνάρτηση ε_2 και μαγνητική διαπερατότητα μ_2 , τοποθετημένο ανάμεσα σε δύο (εν γένει) διαφορετικά μέσα με ε_1, μ_1 και ε_3, μ_3 , χρειάζεται να εφαρμόσει κανείς τις συνοριακές συνθήκες (1.35) στις δύο διεπιφάνειες, λαμβάνοντας υπόψη και όλες τις πολλαπλές ανακλάσεις. Καταλήγουμε τότε στις εξισώσεις του Fresnel [86]

$$r = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(2iq_{2z}h)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(2iq_{2z}h)} \quad (1.42)$$

$$t = \frac{t_{12}t_{23} \exp(iq_{2z}h)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(2iq_{2z}h)},$$

όπου τα r_{12}, r_{23}, t_{12} και t_{23} , δίνονται από τις Εξ. (1.37), (1.38) και (1.40), (1.41) για πόλωση TE και TM, αντίστοιχα.

Θα γενικεύσουμε τώρα το πρόβλημα της ανάκλασης και διάθλασης από διεπιφάνεια, θεωρώντας ότι το μέσο '2' είναι ανισοτροπικό και περιγράφεται από διαγώνιους τανυστές διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας,

$$\overleftrightarrow{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & & \\ & \varepsilon_y & \\ & & \varepsilon_z \end{pmatrix}, \quad \overleftrightarrow{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x & & \\ & \mu_y & \\ & & \mu_z \end{pmatrix}. \quad (1.43)$$

Επιλύοντας και πάλι τις εξισώσεις του Maxwell ως προς τις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου στο μέσο '2' καταλήγουμε στο σύστημα

$$-\frac{1}{\mu_z} \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} - \frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{1}{\mu_z} \frac{\partial^2 E_y}{\partial y \partial x} + \frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2 E_z}{\partial z \partial x} - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_x E_x = 0$$

$$-\frac{1}{\mu_z} \frac{\partial^2 E_x}{\partial y \partial x} + \frac{1}{\mu_z} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} - \frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2 E_z}{\partial z \partial y} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_y E_y = 0$$

$$\frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2 E_x}{\partial x \partial z} + \frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2 E_y}{\partial y \partial z} - \frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} - \frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_z E_z = 0.$$

Από το παραπάνω σύστημα είναι αμέσως σαφές ότι στην περίπτωση ανισοτροπικών μέσων δεν μπορεί να γραφεί μια κυματική εξίσωση τύπου Helmholtz και, κατ' επέκταση, δεν μπορεί να οριστεί ένας δείκτης διάθλασης με τον συνηθισμένο τρόπο.

Υποθέτοντας και πάλι επίπεδα μονοχρωματικά κύματα, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$, και αντίστοιχα για τα \mathbf{D} , \mathbf{B} και \mathbf{H} , από τις εξισώσεις του Maxwell προκύπτει αμέσως ότι τα μεγέθη που είναι κάθετα στο κυματόνισμα είναι τα \mathbf{D} και \mathbf{B} , ενώ λόγω της ταυσιτικής μορφής των συναρτήσεων απόκρισης τα \mathbf{E} και \mathbf{H} δεν μπορούν να θεωρηθούν παράλληλα σε αυτά. Χρειάζεται λοιπόν ιδιαίτερη προσοχή όταν εφαρμόζει κανείς τις συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια των μέσων '1' και '2'. Από τις Εξ. (1.14) και (1.29) καταλήγει κανείς στη σχέση

$$\overleftarrow{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{E} = -\frac{c}{\omega} \mathbf{q} \times \left[\frac{c}{\omega} \overleftarrow{\boldsymbol{\mu}}^{-1} (\mathbf{q} \times \mathbf{E}) \right] \Rightarrow \mathbf{q} \times [\overleftarrow{\boldsymbol{\mu}}^{-1} (\mathbf{q} \times \mathbf{E})] + \frac{\omega^2}{c^2} \overleftarrow{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{E} = 0. \quad (1.44)$$

Η σχέση αυτή οδηγεί σε ένα σύστημα τριών γραμμικών εξισώσεων ως προς τις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon_x \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_y^2}{\mu_z} - \frac{q_z^2}{\mu_y} \right) E_x + \frac{q_x q_y}{\mu_z} E_y + \frac{q_x q_z}{\mu_y} E_z &= 0 \\ \frac{q_x q_y}{\mu_z} E_x + \left(\varepsilon_y \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_x^2}{\mu_z} - \frac{q_z^2}{\mu_x} \right) E_y + \frac{q_y q_z}{\mu_x} E_z &= 0 \\ \frac{q_x q_z}{\mu_y} E_x + \frac{q_y q_z}{\mu_x} E_y + \left(\varepsilon_z \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_x^2}{\mu_y} - \frac{q_y^2}{\mu_x} \right) E_z &= 0. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Προκειμένου το παραπάνω σύστημα να έχει μη μηδενική λύση, θα πρέπει η ορίζουσα των συντελεστών των συνιστωσών του ηλεκτρικού πεδίου να είναι μηδενική. Από την απαίτηση αυτή καταλήγει κανείς στη σχέση διασποράς για το ανισοτροπικό μέσο. Για απλότητα, θα περιοριστούμε στην επίλυση του συστήματος για τις δύο βασικές πολώσεις.

Στην περίπτωση κυμάτων TE, το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο y συνιστώσα. Τότε το σύστημα (1.45) απλοποιείται στη μορφή

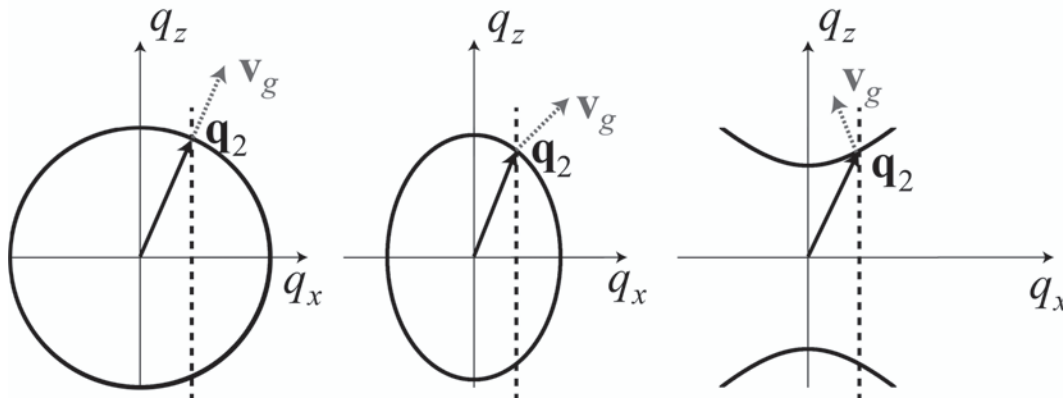
$$\varepsilon_y \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_x^2}{\mu_z} - \frac{q_{(\text{TE})z}^2}{\mu_x} = 0 \Rightarrow \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{q_x^2}{\varepsilon_y \mu_z} + \frac{q_{(\text{TE})z}^2}{\varepsilon_y \mu_x}, \quad (1.46)$$

που είναι η σχέση διασποράς για πόλωση TE. Παρόμοια, στην περίπτωση της πόλωσης TM το μαγνητικό πεδίο είναι αυτό που έχει μόνο y συνιστώσα, ενώ το ηλεκτρικό πεδίο και το κυματόνισμα έχουν συνιστώσες x και z . Τότε το σύστημα (1.45) γίνεται

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon_x \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_{(\text{TM})z}^2}{\mu_y} \right) E_x + \frac{q_x q_{(\text{TM})z}}{\mu_y} E_z &= 0 \\ \frac{q_x q_{(\text{TM})z}}{\mu_y} E_x + \left(\varepsilon_z \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{q_x^2}{\mu_y} \right) E_z &= 0, \end{aligned} \quad (1.47)$$

από το οποίο καταλήγουμε στη σχέση διασποράς για κύματα TM

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{q_x^2}{\varepsilon_z \mu_y} + \frac{q_{(\text{TM})z}^2}{\varepsilon_x \mu_y}. \quad (1.48)$$



Σχήμα 1.4: Κυματανύσματα (συνεχή βέλη) και ταχύτητες ομάδος (διακεκομμένα βέλη) των διαδιδόμενων στο μέσο '2' κυμάτων, για ένα κύμα που προσπίπτει από το ομοιογενές και ισότροπο μέσο '1' με θετική συνιστώσα q_x , σε μια δεδομένη συχνότητα. Στο αριστερό διάγραμμα το μέσο '2' είναι ισότροπο, με $\epsilon, \mu > 0$. Στο μεσαίο διάγραμμα το μέσο '2' είναι ανισοτροπικό, με όλα τα στοιχεία των ταυυστών (1.43) θετικά. Στο δεξιό διάγραμμα το μέσο '2' είναι ανισοτροπικό, με $\mu_z < 0$ για πόλωση TE ή $\epsilon_z < 0$ για πόλωση TM. Οι κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές παρέχουν τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος. Σε όλα τα διαγράμματα υποθέτουμε ότι η συχνότητα αυξάνεται προς τα έξω.

Όπως αναφέραμε, για ανισοτροπικά μέσα δεν μπορεί να οριστεί ένας δείκτης διάθλασης με τον συνηθισμένο τρόπο. Αυτό ωστόσο δεν σημαίνει ότι δεν μπορεί να παρουσιαστεί το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης σε τέτοια μέσα. Αντίθετα, έχει αποδειχθεί ότι, αν σε ένα ανισοτροπικό μέσο δεν έχουν όλες οι συνιστώσες των ταυυστών (1.43) το ίδιο πρόσημο, είναι δυνατό να παρουσιάζεται αρνητική διάθλαση και ένα κύμα να διαδίδεται σε αυτό το μέσο με ταχύτητες φάσης και ομάδος που έχουν αντίθετες διευθύνσεις (οπισθοδιαδιδόμενα κύματα) [87]. Τέτοια μέσα αποκαλούνται στη βιβλιογραφία *αόριστα* [88]. Η ανάλυσή τους γίνεται μέσω της σχέσης διασποράς τους, Εξ. (1.46) και (1.48) για πόλωση TE και TM, αντίστοιχα. Για κάθε συχνότητα μπορούμε, από τη σχέση διασποράς του μέσου, να σχεδιάσουμε τις καμπύλες σταθερής συχνότητας, $\omega(\mathbf{q}) = \text{σταθ.}$. Στο Σχ. 1.4 δείχνουμε τέτοιες καμπύλες για τρεις χαρακτηριστικές περιπτώσεις: ένα ισότροπο μέσο με $\epsilon, \mu > 0$, ένα ανισοτροπικό μέσο στο οποίο όλες οι συνιστώσες των ταυυστών (1.43) είναι θετικές, και ένα μέσο στο οποίο μία από τις συνιστώσες των ταυυστών (1.43) είναι αρνητική. Επιλέγουμε να παρουσιάσουμε τις ισοδύναμες περιπτώσεις $\mu_z < 0$ για πόλωση TE και $\epsilon_z < 0$ για πόλωση TM, που θα μας απασχολήσουν ξανά στα επόμενα κεφάλαια. Στην περίπτωση του ισότροπου μέσου η σχέση διασποράς, $q_x^2 + q_z^2 = \omega^2 \epsilon \mu / c^2$, αντιπροσωπεύει έναν κύκλο στο επίπεδο $q_x - q_z$. Στην περίπτωση ανισοτροπικού μέσου (και έστω πόλωσης TE) η σχέση (1.46) αντιπροσωπεύει έλλειψη ή υπερβολή, ανάλογα με τα πρόσημα των συνιστωσών των ταυυστών (1.43). Όταν ένα κύμα με θετικές συνιστώσες του κυματανύσματος q_x και q_z προσπίπτει στη διαχωριστική επιφάνεια των μέσων '1' και '2', η παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος (q_x) διατηρείται. Στο Σχ. 1.4 η συνθήκη αυτή παρέχεται από τις κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές. Οι τομές αυτής της γραμμής με την καμπύλη σταθερής συχνότητας

του μέσου '2' προσφέρουν σε κάθε περίπτωση δύο δυνατές επιλογές για το κυματόνισμα του διαθλώμενου κύματος. Η επιλογή του πραγματικού διαθλώμενου κύματος γίνεται υπολογίζοντας τη διεύθυνση της ταχύτητας ομάδος, που είναι εξ ορισμού κάθετη στις καμπύλες σταθερής συχνότητας και καθορίζει τη ροή ενέργειας. Η ροή ενέργειας της διαθλώμενης ακτίνας θα πρέπει να απομακρύνεται από τη διεπιφάνεια, προς το μέσο '2' (θετική z συνιστώσα της \mathbf{v}_g) (αρχή της αιτιότητας) [87,89,90]. Επιπλέον, από τις δύο καθέτους που μπορούμε να φέρουμε σε κάθε σημείο της καμπύλης σταθερής συχνότητας επιλέγουμε, για λόγους αιτιότητας, αυτή που δείχνει προς αύξουσα συχνότητα (στο Σχ. 1.4 έχουμε υποθέσει ότι πάντα η συχνότητα αυξάνεται προς τα έξω, πχ προς κύκλο μεγαλύτερης ακτίνας, που είναι και η πιο συνηθισμένη περίπτωση). Με τον τρόπο αυτό, στο αριστερό και το μεσαίο διάγραμμα του Σχ. 1.4 προκύπτουν ταχύτητες ομάδος με θετική συνιστώσα x (θετική διάθλαση), ενώ στο δεξιό διάγραμμα προκύπτει ταχύτητα ομάδος με αρνητική συνιστώσα x (αρνητική διάθλαση).

Θεωρώντας τώρα τη διεπιφάνεια των μέσων '1' και '2', ακολουθώντας την ίδια διαδικασία εφαρμογής των συνοριακών συνθήκων όπως στην περίπτωση του ισότροπου μέσου, και προσέχοντας ιδιαίτερα να λαμβάνονται σωστά οι καθετότητες των σχετικών διανυσμάτων, καταλήγουμε στους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης για πόλωση TE

$$r_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E'_1}{E_1} = \frac{\mu_x q_{1(\text{TE})z} - \mu_1 q_{2(\text{TE})z}}{\mu_x q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}} \quad (1.49)$$

$$t_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E_2}{E_1} = \frac{2\mu_x q_{1(\text{TE})z}}{\mu_x q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}}, \quad (1.50)$$

και για πόλωση TM

$$r_{12(\text{TM})} \equiv \frac{D'_1}{D_1} = \frac{\varepsilon_x q_{1(\text{TM})z} - \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}}{\varepsilon_x q_{1(\text{TM})z} + \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}} \quad (1.51)$$

$$t_{12(\text{TM})} \equiv \frac{D_2}{D_1} = \frac{2\varepsilon_x q_{1(\text{TM})z} \frac{q_2}{q_1}}{\varepsilon_x q_{1(\text{TM})z} + \varepsilon_1 q_{2(\text{TM})z}}. \quad (1.52)$$

Σημειώνουμε ότι, στην περίπτωση ισότροπου μέσου, τα διαγώνια στοιχεία των τανυστών διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας είναι ίσα ($\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z \equiv \varepsilon$, $\mu_x = \mu_y = \mu_z \equiv \mu$), και οι Εξ. (1.46) και (1.48) ανάγονται στην απλή σχέση διασποράς $q^2 = \omega^2 \varepsilon \mu / c^2$, οι δε Εξ. (1.49), (1.50) και (1.51), (1.52) ανάγονται στις (1.37), (1.38), (1.40) και (1.41), αντίστοιχα.

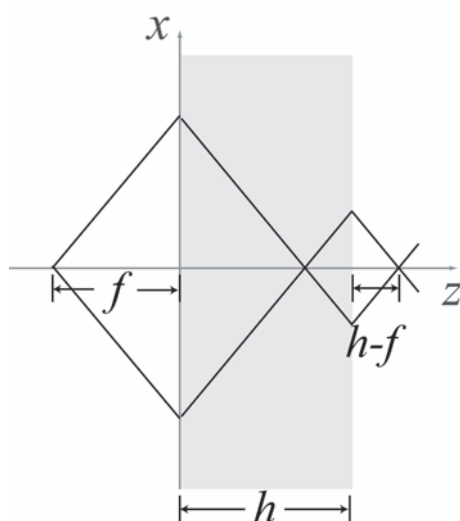
1.3 Υπερφακοί αρνητικής διάθλασης

Είναι γνωστό ότι η διακριτική ικανότητα ενός φακού περιορίζεται από το μήκος κύματος [86]. Από τη σχέση διασποράς του ομοιογενούς ισότροπου μέσου, $q^2 = \omega^2 \varepsilon \mu / c^2$, αν θεωρήσουμε ως άξονα του φακού τον άξονα z , προκύπτει αμέσως ότι η συνιστώσα του κυματόνισματος στη διεύθυνση διάδοσης είναι $q_z = \sqrt{\varepsilon \mu (\omega/c)^2 - q_x^2 - q_y^2}$, η οποία είναι πραγματική για $q_x^2 + q_y^2 < \varepsilon \mu (\omega/c)^2$ και φανταστική για $q_x^2 + q_y^2 > \varepsilon \mu (\omega/c)^2$. Η πρώτη περίπτωση αντιστοιχεί σε διαδιδόμενα και η δεύτερη σε φθίνοντα κύματα. Θα περιορίσουμε την ανάλυση, χωρίς βλάβη της γενικότητας, κατά τη διεύθυνση x . Όπως είδαμε στο Εδ. 1.1, ένα κυματοπακέτο εύρους

Δx έχει εύρος Δq_x , με $\Delta x \gtrsim 2\pi/\Delta q_x$. Όμως τα διαδιδόμενα κύματα, που σχηματίζουν το είδωλο, είναι αυτά για τα οποία $q_x^2 + q_y^2 < \varepsilon\mu(\omega/c)^2$, ή, στην ιδανική περίπτωση $\varepsilon = \mu = 1$ (στο κενό), $q_x^2 + q_y^2 < (\omega/c)^2$. Άρα, η μέγιστη απροσδιοριστία κατά τον άξονα x είναι $\Delta q_x = \omega/c$. Συνεπώς

$$\Delta x \gtrsim \frac{2\pi}{\Delta q_x} = \frac{2\pi c}{\omega} = \lambda. \quad (1.53)$$

Ο περιορισμός αυτός στη διακριτική ικανότητα του φακού δεν έχει να κάνει με την κατασκευή του, αλλά με τις φυσικές αρχές λειτουργίας του. Ωστόσο, αποδεικνύεται ότι ένα πλακίδιο από υλικό με $\varepsilon = \mu = -1$ μπορεί να δράσει ως υπερφακός, χωρίς τον παραπάνω περιορισμό στη διακριτική του ικανότητα [7].



Σχήμα 1.5: Αρνητική διάθλαση και εστίαση σε ένα πλακίδιο με δείκτη διάθλασης $n = -1$

Όπως φαίνεται στο Σχ. 1.5, για ένα πλακίδιο πάχους h με $\varepsilon = \mu = -1$ στο κενό, οι ακτίνες μιας σημειακής φωτεινής πηγής σε απόσταση $f < h$ από την αριστερή επιφάνεια του πλακιδίου εστιάζουν, λόγω αρνητικής διάθλασης, μία φορά μέσα στο πλακίδιο και μία φορά έξω από αυτό, σε απόσταση $h - f$ στα δεξιά του. Επιπλέον, όπως φαίνεται από τις Εξ. (1.42) για ένα υλικό με $\varepsilon = \mu = -1$, ο συντελεστής διέλευσης είναι $t = \exp(-iq_z h)$ και ο συντελεστής ανάκλασης $r = 0$, δηλαδή όλη η ενέργεια της ΗΜ ακτινοβολίας διέρχεται από το πλακίδιο χωρίς απώλειες από ανάκλαση. Επιπλέον, έχει ενδιαφέρον ότι κάθε διαδιδόμενο επίπεδο κύμα - συνιστώσα του συνολικού κύματος που εκπέμπεται από τη σημειακή φωτεινή πηγή - υφίσταται μετά τη διέλευσή του από το πλακίδιο μια αλλαγή στη φάση, $-q_z h$, που αντισταθμίζει ακριβώς τη διαφορά φάσης που αποκτά κατά τη διαδρομή του στο περιβάλλον μέχρι να φτάσει στην εστία, $q_z f + q_z(h - f)$, ενώ το πλάτος και η πόλωσή του παραμένουν προφανώς αμετάβλητα. Αντίστοιχα, κάθε φθίνον κύμα - συνιστώσα του συνολικού κύματος που εκπέμπεται από τη σημειακή φωτεινή πηγή - υφίσταται μια αύξηση στο πλάτος, $\exp(q_z h)$, που αντισταθμίζει ακριβώς την εξασθένισή του κατά τη διαδρομή του στο περιβάλλον μέχρι να φθάσει στην εστία, $\exp(-q_z f) \exp(-q_z[h - f])$, ενώ η φάση και η πόλωσή του παραμένουν προφανώς

αμετάβλητες. Έτσι, σε έναν τέτοιο φακό, όλες οι συνιστώσες του κύματος, διαδιδόμενες και φθίνουσες, συμβάλλουν στην εστία με το αρχικό πλάτος, φάση και πόλωση, ώστε να κατασκευάσουν ένα πανομοιότυπο σημειακό είδωλο. Στην πράξη βέβαια δεν είναι δυνατό να επιτευχθεί υλικό με $\text{Re}\epsilon = \text{Re}\mu = -1$ ακριβώς, ενώ και τα φανταστικά μέρη των ϵ και μ θα είναι διάφορα του μηδενός. Συνεπώς η διακριτική ικανότητα ενός φακού που βασίζεται στην αρνητική διάθλαση θα περιορίζεται από τις ρεαλιστικές συναρτήσεις απόκρισης του υλικού, και θα είναι τόσο καλύτερη όσο πιο κοντά βρίσκονται αυτές οι συναρτήσεις στην ιδανική τιμή -1 .

1.4 Λύση της κυματικής εξίσωσης σε μορφή σφαιρικών κυμάτων

Στο υπόλοιπο της διατριβής θα μας απασχολήσει η σκέδαση ενός επίπεδου κύματος από μεμονωμένα σωματίδια και περιοδικές διατάξεις τέτοιων σωματιδίων. Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, είναι βολικό να εκφράσουμε τη λύση της κυματικής εξίσωσης στη μορφή διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων. Αυτή η μορφή αποδεικνύεται πολλές φορές χρησιμότερη σε σύνθετες γεωμετρίες (όπως αυτές που θα εξετάσουμε στη συνέχεια). Ένα πλήρες σύνολο λύσεων [91] της Εξ. (1.14) αποτελούν τα διαμήκη (τετριμμένες λύσεις)

$$\mathbf{J}_{L\ell m q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q} \nabla [j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})], \quad \mathbf{H}_{L\ell m q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q} \nabla [h_\ell^+(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] , \quad (1.54)$$

και τα εγκάρσια σφαιρικά κύματα

$$\mathbf{J}_{H\ell m q}(\mathbf{r}) = j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}), \quad \mathbf{H}_{H\ell m q}(\mathbf{r}) = h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.55)$$

και

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{E\ell m q}(\mathbf{r}) &= \frac{\mathbf{i}}{q} \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{\mathbf{i}}{q} \nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m q}(\mathbf{r}) , \\ \mathbf{H}_{E\ell m q}(\mathbf{r}) &= \frac{\mathbf{i}}{q} \nabla \times h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{\mathbf{i}}{q} \nabla \times \mathbf{H}_{H\ell m q}(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (1.56)$$

Οι λύσεις αυτές εκφράζονται συναρτήσεις των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel και Hankel, $j_\ell(qr)$ και $h_\ell^+(qr)$, αντίστοιχα (βλ. Παράρτημα Β'), και των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών, $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$, ενώ $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ είναι οι συνήθεις σφαιρικές αρμονικές (βλ. Παράρτημα Γ'). Κάθε μία από τις λύσεις (1.54), (1.55) και (1.56) χαρακτηρίζεται από την τιμή του q , τους δείκτες της στροφορμής ℓ , m , και τον δείκτη $P = L, E, H$. Για απλότητα χρησιμοποιούμε τον δείκτη L (που δεν θα πρέπει να συγχέεται με τον δείκτη L που χαρακτηρίζει τα διαμήκη κύματα) για να δηλώνουμε συλλογικά τους δείκτες $P\ell m$ στην περίπτωση των μη τετριμμένων λύσεων, δηλαδή για $P = E, H$, $\ell = 1, \dots, \infty$, $m = -\ell, \dots, \ell$. Σημειώνεται ότι οι λύσεις \mathbf{J} παρουσιάζουν ομαλή συμπεριφορά σε κάθε σημείο, σε αντίθεση με τις \mathbf{H} οι οποίες έχουν μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων για $r \rightarrow \infty$ και απειρίζονται στο $r = 0$.

Στη γενική περίπτωση, το ΗΜ πεδίο σε ένα ομοιογενές μέσο, για δεδομένη συχνότητα ω , γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των $\mathbf{J}_L(\mathbf{r})$ και $\mathbf{H}_L(\mathbf{r})$ σε αυτή τη συχνότητα

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_L [a_L^0 \mathbf{J}_L(\mathbf{r}) + a_L^+ \mathbf{H}_L(\mathbf{r})] , \quad (1.57)$$

όπου έχουμε παραλείψει τον δείκτη q που είναι πλήρως καθορισμένος για ένα εγκάρσιο ΗΜ πεδίο σε δεδομένη συχνότητα, και οι συντελεστές a_L^0 , a_L^+ είναι προς προσδιορισμό. Έστω τώρα ένα (εγκάρσιο) επίπεδο κύμα της μορφής (1.16). Δεδομένου ότι ένα τέτοιο κύμα είναι πεπερασμένο παντού στον χώρο, η πολυπολική του ανάπτυξη σε σφαιρικά κύματα, σύμφωνα με τις Εξ. (1.55) και (1.56), δεν μπορεί παρά να περιέχει μόνο τις $j_\ell(qr)$. Επομένως

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_L a_L^0 \mathbf{J}_L(\mathbf{r}) . \quad (1.58)$$

Γράφουμε τους συντελεστές a_L^0 στη μορφή

$$a_L^0 = \mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) , \quad (1.59)$$

με τα διανύσματα $\mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}})$ να ορίζονται στο επίπεδο των $\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q})$, $\hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (1.58) και κάνοντας χρήση του αναπτύγματος [92]

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (1.60)$$

καθώς και σχέσεων του Παραρτήματος Γ', καταλήγουμε στις εκφράσεις για τα $\mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}})$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{E\ell m}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\psi_\ell} \\ &\times \left\{ i \left[\alpha_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - \alpha_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \right. \\ &- \left[\alpha_\ell^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \right. \\ &+ \left. \left. \alpha_\ell^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \right\} \\ &= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \times \mathbf{q} \end{aligned} \quad (1.61)$$

και

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{H\ell m}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\psi_\ell} \\ &\times \left\{ \left[\alpha_\ell^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \right. \right. \\ &+ \left. \left. \alpha_\ell^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \right. \\ &+ \left. i \left[\alpha_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - \alpha_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \right\} \\ &= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) , \end{aligned} \quad (1.62)$$

όπου θ και ϕ είναι οι γωνιακές μεταβλητές του \mathbf{q} και $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ είναι, θυμίζουμε, το πολικό και αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, αντίστοιχα, που είναι κάθετα στο \mathbf{q} στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (βλ. Σχ 1.1). Στις παραπάνω εκφράσεις έχουμε θέσει

$$\psi_\ell = \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (1.63)$$

και

$$\alpha_\ell^m = \frac{1}{2} [(\ell - m)(\ell + m + 1)]^{1/2} . \quad (1.64)$$

Σημειώνουμε ότι η συνιστώσα z του κυματανύσματος, q_z , μπορεί να είναι πραγματική ή φανταστική. Στη δεύτερη περίπτωση το $\cos\theta$ στις εκφράσεις των $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}})$ (βλ. Παράρτημα Γ') αντικαθίσταται από το q_z/q .

Κεφάλαιο 2

Η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης

Ανάμεσα στις μεθόδους που έχουν αναπτυχθεί για τη θεωρητική μελέτη περιοδικών φωτονικών δομών (βλ. Εισαγωγή), η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης (Layer-Multiple-Scattering, LMS) [80–82] 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 διδιάστατες (2Δ) περιοδικές δομές σωματιδίων με την ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα για τη σκέδαση μεταξύ διαδοχικών επιπέδων από σκεδαστές. Οι δομές που μπορεί να περιγράψει συνίστανται από 2Δ επίπεδα ομοιογενών πλακιδίων ή περιοδικών διατάξεων σφαιρικών σκεδαστών, ή και συνδυασμούς των παραπάνω, με μόνη προϋπόθεση τα επίπεδα 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. Πρόσφατα η μέθοδος επεκτάθηκε προκειμένου να περιλαμβάνει και μη σφαιρικούς σκεδαστές, ανοίγοντας νέους δρόμους για την περιγραφή και τον σχεδιασμό φωτονικών δομών [93, 94]. Επιπλέον, επειδή η μέθοδος LMS επιλύει τις εξισώσεις του Maxwell στο πεδίο των συχνοτήτων, είναι ιδανική για την περιγραφή υλικών με διασπορά, όπως είναι για παράδειγμα τα μέταλλα.

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζουμε εκτενώς τη μέθοδο LMS, ξεκινώντας από τη σκέδαση από μεμονωμένο σκεδαστή, όπου προσθέτουμε τη δυνατότητα μελέτης σύνθετων, πολυστρωματικών σφαιρικών σωματιδίων και συνυπολογισμού της επίδρασης μη τοπικών φαινομένων σε σφαιρικούς σκεδαστές [95–98]. Στη συνέχεια εξετάζουμε την πολλαπλή σκέδαση σε ένα επίπεδο σκεδαστών και τον συνδυασμό διαδοχικών επιπέδων αλλάζοντας βάση ανάπτυξης των ΗΜ κυμάτων, από σφαιρικά σε επίπεδα. Δείχνουμε πώς με τη βοήθεια της μεθόδου LMS 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, συσχετισμένης με ένα δεδομένο κρυσταλλογραφικό επίπεδο, μέσω του πίνακα σκέδασης των διαδοχικών επιπέδων των σκεδαστών [81, 82]. Η μιγαδική φωτονική δομή ζωνών μπορεί να υπολογιστεί και μέσω του πίνακα μετάβασης από ένα επίπεδο στο επόμενο, μέθοδος που προσφέρει επίσης τη δυνατότητα υπολογισμού του συντελεστή ανάκλασης [40] και των επιφανειακών καταστάσεων (αν υπάρχουν) [99] του αντίστοιχου ημιάπειρου κρυστάλλου. Τέλος, εισάγουμε την έννοια των επιφανειών σταθερής συχνότητας, που μπορούν να περιγράψουν τη διαθλαστική συμπεριφορά του κρυστάλλου [100–102].

2.1 Σκέδαση από μεμονωμένο σκεδαστή

Στην παρούσα διατριβή θα μας απασχολήσουν σκεδαστές με σφαιρική ή κυλινδρική συμμετρία. Το πρόβλημα της σκέδασης ΗΜ ακτινοβολίας από μεμονωμένα σωματίδια ανάγεται ουσιαστικά στον υπολογισμό του πίνακα σκέδασης, \mathbf{T} , που συνδέει το πλάτος του σκεδαζόμενου με αυτό του προσπίπτοντος στον σκεδαστή κύματος. Για ομοιογενείς σφαιρικούς σκεδαστές το πρόβλημα έχει λυθεί αναλυτικά από τους Mie [103] και Debye [104]. Για πολυστρωματικούς σφαιρικούς σκεδαστές μπορούν και πάλι να υπολογιστούν αναλυτικές λύσεις, οι οποίες είναι όμως πολύπλοκες, οπότε είναι προτιμότερο να καταφύγει κανείς σε επαναληπτικές μεθόδους [95, 98, 105–107]. Τέλος, στην περίπτωση μη σφαιρικών σωματιδίων ο πίνακας σκέδασης υπολογίζεται αριθμητικά [93, 94].

Έστω ένα ομοιογενές σωματίδιο, τοποθετημένο στην αρχή του συστήματος συντεταγμένων, του οποίου η σχετική διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ_1 , και η μαγνητική διαπερατότητα, μ_1 , εν γένει μιγαδικές συναρτήσεις της συχνότητας ω , είναι διαφορετικές από αυτές του περιβάλλοντος μέσου, ϵ και μ , αντίστοιχα. Ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο σωματίδιο γράφεται σε αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων στη μορφή [Εξ. (1.57)]

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{L}} a_{\mathbf{L}}^0 \mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}) . \quad (2.1)$$

Το πολυπολικό ανάπτυγμα του σκεδαζόμενου κύματος περιλαμβάνει μόνο σφαιρικά κύματα $\mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r})$, επειδή αυτά είναι που έχουν ασυμπτωτική μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων: $h_{\ell}^+(qr) \approx (-i)^{\ell} \exp(iqr)/iqr$ για $r \rightarrow \infty$. Έτσι γράφουμε

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{L}} a_{\mathbf{L}}^+ \mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}) . \quad (2.2)$$

Το πεδίο στον χώρο μέσα στο σωματίδιο θα περιλαμβάνει μόνο σφαιρικά κύματα που έχουν ομαλή συμπεριφορά στην αρχή των αξόνων,

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{L}} a_{\mathbf{L}}^{\text{in}} \mathbf{J}_{\mathbf{L}}^1(\mathbf{r}) . \quad (2.3)$$

Οι $\mathbf{J}_{\mathbf{L}}^1(\mathbf{r})$ προκύπτουν από τις $\mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r})$ [Εξ. (1.55), (1.56)] αντικαθιστώντας το $q = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$ με το $q_1 = \omega\sqrt{\epsilon_1\mu_1}/c$. Για παράδειγμα, στην απλή περίπτωση μιας σφαίρας ακτίνας S (βλ. Σχ. 2.1), τα πεδία \mathbf{E}_0 , \mathbf{E}_{sc} και \mathbf{E}_{in} γράφονται αναλυτικά

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=1}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^0 \nabla \times j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^0 j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] , \quad (2.4)$$

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=1}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^+ \nabla \times h_{\ell}^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^+ h_{\ell}^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] , \quad (2.5)$$

και

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=1}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[\frac{i}{q_1} a_{E\ell m}^{\text{in}} \nabla \times j_{\ell}(q_1 r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^{\text{in}} j_{\ell}(q_1 r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] . \quad (2.6)$$

Οι συντελεστές a_L^+ του σχεδασμένου κύματος μπορούν, εν γένει, να εκφραστούν συναρτήσει αυτών του προσπίπτοντος μέσω του πίνακα σκέδασης \mathbf{T}

$$a_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} a_{L'}^0 . \quad (2.7)$$

Η τελευταία σχέση αποτελεί τον ορισμό του πίνακα \mathbf{T} , ο οποίος, όπως φαίνεται στην Εξ. (2.7), στη γενική περίπτωση είναι μη διαγώνιος· για σχεδαστές με σφαιρική συμμετρία είναι διαγώνιος ως προς P και ℓ και ανεξάρτητος του m .

Στην περίπτωση σχεδαστών με σφαιρική συμμετρία ο υπολογισμός του πίνακα σκέδασης γίνεται ως εξής: Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των εφαπτομενικών συστωσών των πεδίων στη διαχωριστική επιφάνεια, $r = S$ (όπου S η ακτίνα της σφαίρας),

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \\ [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \\ [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) , \end{aligned} \quad (2.8)$$

με

$$\mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \quad \text{και} \quad \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) , \quad (2.9)$$

καταλήγουμε σε λύσεις της μορφής:

$$a_{P\ell m}^+ = T_{P\ell} a_{P\ell m}^0 , \quad (2.10)$$

όπου

$$T_{E\ell} = \frac{j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(qr)] \varepsilon_1 - j_\ell(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \varepsilon}{h_\ell^+(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \varepsilon - j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(qr)] \varepsilon_1} \Bigg|_{r=S} \quad (2.11)$$

$$T_{H\ell} = \frac{j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(qr)] \mu_1 - j_\ell(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \mu}{h_\ell^+(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \mu - j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(qr)] \mu_1} \Bigg|_{r=S} . \quad (2.12)$$

Στην περίπτωση μεγάλων μεταλλικών σφαιρών, και σε περιοχές συχνοτήτων όπου η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου είναι πολύ μεγάλη κατ' απόλυτη τιμή, το όρισμα των συναρτήσεων Bessel, qr , γίνεται πολύ μεγάλο και οι $j_\ell(q_1 r)$ πάλλονται ταχύτατα συναρτήσει του r . Προκειμένου να υπολογίσουμε τον πίνακα σκέδασης, είναι βολικό να ξαναγράψουμε την Εξ. (2.11), χρησιμοποιώντας την Εξ. (B.21), στη μορφή

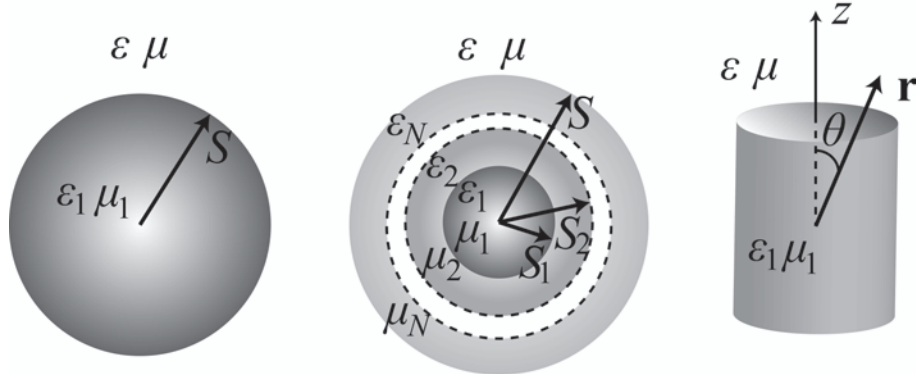
$$T_{E\ell} = \frac{\ell(\varepsilon - \varepsilon_1) j_\ell(qr) + qr j_{\ell-1}(qr) \varepsilon_1 - q_1 r j_\ell(qr) \frac{j_{\ell-1}(q_1 r)}{j_\ell(q_1 r)} \varepsilon}{\ell(\varepsilon_1 - \varepsilon) h_\ell^+(qr) - qr h_{\ell-1}^+(qr) \varepsilon_1 + q_1 r h_\ell^+(qr) \frac{j_{\ell-1}(q_1 r)}{j_\ell(q_1 r)} \varepsilon} \Bigg|_{r=S} , \quad (2.13)$$

και, χρησιμοποιώντας την ασυμπτωτική σχέση (B.23), να δείξουμε ότι $j_{\ell-1}(q_1 r)/j_\ell(q_1 r) \rightarrow -i$, οπότε ο πίνακας σκέδασης για το ηλεκτρικό κομμάτι γίνεται

$$T_{E\ell} = \frac{\ell j_\ell(qr) (\varepsilon - \varepsilon_1) + qr j_{\ell-1}(qr) \varepsilon_1 + i q_1 r j_\ell(qr) \varepsilon}{\ell h_\ell^+(qr) (\varepsilon_1 - \varepsilon) - qr h_{\ell-1}^+(qr) \varepsilon_1 - i q_1 r h_\ell^+(qr) \varepsilon} \Bigg|_{r=S} , \quad (2.14)$$

και όμοια για το μαγνητικό κομμάτι,

$$T_{He} = \frac{\ell j_\ell(qr) (\mu - \mu_1) + qr j_{\ell-1}(qr) \mu_1 + iq_1 r j_\ell(qr) \mu}{\ell h_\ell^+(qr) (\mu_1 - \mu) - qr h_{\ell-1}^+(qr) \mu_1 - iq_1 r h_\ell^+(qr) \mu} \Big|_{r=S} . \quad (2.15)$$



Σχήμα 2.1: Σχεδιαστές διαφόρων σχημάτων σε περιβάλλον που περιγράφεται από συναρτήσεις απόκρισης ε και μ . Αριστερά: Μια ομοιογενής σφαίρα ακτίνας S και συναρτήσεων απόκρισης ε_1, μ_1 . Κέντρο: Μια πολυστρωματική σφαίρα, αποτελούμενη από $n = 1, 2, \dots, N$ ομόκεντρα στρώματα με ακτίνες S_n ($S_N \equiv S$) και συναρτήσεις απόκρισης ε_n, μ_n . Δεξιά: Ένας σχεδιαστής κυλινδρικής συμμετρίας με συναρτήσεις απόκρισης ε_1, μ_1 .

Στην περίπτωση μικρών μεταλλικών σφαιρών η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου μπορεί να εξαρτάται από το κυματόνισμα (μη τοπική απόκριση). Τότε εμφανίζονται επιπλέον διαμήκεις καταστάσεις του HM πεδίου στο εσωτερικό της σφαίρας, για $\varepsilon_{1L}(\mathbf{q}, \omega) = 0$, όπου ε_{1L} είναι η διαμήκης διηλεκτρική συνάρτηση [108]. Ένα απλό αλλά αποτελεσματικό μοντέλο για την περιγραφή τέτοιας διηλεκτρικής συνάρτησης είναι το υδροδυναμικό μοντέλο (βλ. Παράρτημα Δ'). Προφανώς, στην περίπτωση αυτή η έκφραση για το ηλεκτρικό πεδίο στο εσωτερικό της σφαίρας, Εξ. (2.6), πρέπει να αλλάξει ώστε να συμπεριλάβει έναν διαμήκη όρο, της μορφής $(1/q_{1L}) a_{L\ell m}^{\text{in}} \nabla [Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) j_\ell(q_{1L} r)]$, όπου $q_{1L} = \omega \sqrt{\varepsilon_{1L} \mu_1} / c$ ο διαμήκης κυματάνισμα και $a_{L\ell m}^{\text{in}}$ ο κατάλληλος συντελεστής, ενώ το μαγνητικό πεδίο παραμένει ως έχει. Στις συνοριακές συνθήκες Εξ. (2.8) προστίθεται η

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\hat{\mathbf{r}}) = \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\hat{\mathbf{r}}) . \quad (2.16)$$

Τότε, το ηλεκτρικό κομμάτι του πίνακα σκέδασης προκύπτει [109]

$$T_{E\ell} = - \frac{c_L j_\ell(qr) + \frac{\partial j_\ell(q_{1L} r)}{\partial (q_{1L} r)} \{ j_\ell(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \varepsilon - j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(qr)] \varepsilon_1 \}}{c_L j_\ell(qr) + \frac{\partial j_\ell(q_{1L} r)}{\partial (q_{1L} r)} [h_\ell^+(qr) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_1 r)] \varepsilon - j_\ell(q_1 r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(qr)] \varepsilon_1]} \Big|_{r=S} , \quad (2.17)$$

όπου

$$c_L = \ell(\ell + 1) \frac{j_\ell(q_{1L} r)}{q_{1L} r} j_\ell(q_1 r) (\varepsilon_1 - \varepsilon) . \quad (2.18)$$

Για μια πολυστρωματική σφαίρα αποτελούμενη από $n = 1, 2, \dots, N$ ομόκεντρα στρώματα, καθένα εκ των οποίων έχει ακτίνα S_n ($S_N \equiv S$) και περιγράφεται από διηλεκτρική συνάρτηση ε_n και μαγνητική διαπερατότητα μ_n (βλ. Σχ. 2.1), μπορούμε να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των πεδίων, Εξ. (2.8), στις διαδοχικές διαχωριστικές επιφάνειες, θεωρώντας κάθε φορά ότι τα n πρώτα στρώματα βρίσκονται σε περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε_{n+1} . Τότε ο πίνακας σκέδασης για μια σφαίρα με τα n πρώτα στρώματα σε περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε_{n+1} , $T_{E\ell}^{(n)}$, συνδέεται με αυτόν μιας σφαίρας με τα $n-1$ πρώτα στρώματα σε περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε_n , $T_{E\ell}^{(n-1)}$, μέσω της σχέσης:

$$T_{E\ell}^{(n)} = \frac{A_E^{(n,n+1)} + T_{E\ell}^{(n-1)} B_E^{(n,n+1)}}{\Gamma_E^{(n,n+1)} + T_{E\ell}^{(n-1)} \Delta_E^{(n,n+1)}} \Bigg|_{r=S_n}, \quad (2.19)$$

όπου:

$$\begin{aligned} A_E^{(n,n+1)} &= j_\ell(q_n r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_{n+1} r)] \varepsilon_n - j_\ell(q_{n+1} r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_n r)] \varepsilon_{n+1} \\ B_E^{(n,n+1)} &= h_\ell^+(q_n r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_{n+1} r)] \varepsilon_n - j_\ell(q_{n+1} r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(q_n r)] \varepsilon_{n+1} \\ \Gamma_E^{(n,n+1)} &= h_\ell^+(q_{n+1} r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_\ell(q_n r)] \varepsilon_{n+1} - j_\ell(q_n r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(q_{n+1} r)] \varepsilon_n \\ \Delta_E^{(n,n+1)} &= h_\ell^+(q_{n+1} r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(q_n r)] \varepsilon_{n+1} - h_\ell^+(q_n r) \frac{\partial}{\partial r} [r h_\ell^+(q_{n+1} r)] \varepsilon_n. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Ακριβώς ίδια είναι και η έκφραση για τον πίνακα $T_{H\ell}^{(n)}$, όπου βέβαια ο δείκτης της πόλωσης είναι H αντί για E και στη θέση των διηλεκτρικών συναρτήσεων, $\varepsilon_n, \varepsilon_{n+1}$, μπαίνουν οι αντίστοιχες μαγνητικές διαπερατότητες, μ_n, μ_{n+1} . Προφανώς, αν κάποιο από τα στρώματα είναι αρκετά λεπτό ώστε να είναι πιθανή η διέγερση διαμήκων κυμάτων, αυτή θα πρέπει να ληφθεί υπόψη προσθέτοντας τους κατάλληλους όρους στο ηλεκτρικό πεδίο του στρώματος αυτού: για το κεντρικό στρώμα, όπου το πεδίο πρέπει να είναι πεπερασμένο, είναι αρκετό να προστεθεί ο όρος $(1/q_{1L}) a_{L\ell m}^{(1)} \nabla [Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) j_\ell(q_{1L} r)]$. Για οποιοδήποτε άλλο στρώμα όμως, όπου υπάρχουν τόσο εισερχόμενα όσο και εξερχόμενα σφαιρικά κύματα, πρέπει να προστεθεί επιπλέον ένας όρος της μορφής $(1/q_{nL}) a_{L\ell m}^{(n)} \nabla [Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) h_\ell^+(q_{nL} r)]$. Ο πίνακας σκέδασης υπολογίζεται και πάλι εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες, Εξ. (2.8) και (2.16), σε κάθε διεπιφάνεια. Οι σχέσεις που προκύπτουν είναι ιδιαίτερα μακροσκελείς και είναι προτιμότερο η επίλυση να γίνει αριθμητικά [106]. Η ακριβής μορφή του για την περίπτωση μεταλλικού νανοφλοιού, όπου έχουμε δύο στρώματα υλικών με τα διαμήκη κύματα να παρουσιάζονται στο μεταλλικό (εξωτερικό) στρώμα, παρουσιάζεται στο Παράρτημα Ε'. Τέλος, στην περίπτωση μη σφαιρικών σχεδιαστών, όπως αυτοί που θα εξετάσουμε στη συνέχεια, ο υπολογισμός ενός πίνακα σκέδασης που να λαμβάνει υπόψη μη τοπικά φαινόμενα είναι ιδιαίτερα απαιτητικός [110, 111] και ξεφεύγει από τα όρια της παρούσας διατριβής. Εξάλλου, οι δομές που θα μας απασχολήσουν είναι αρκετά μεγάλων διαστάσεων ώστε τα μη τοπικά φαινόμενα να μπορούν να αγνοηθούν.

Στην περίπτωση μη σφαιρικών σχεδιαστών, και στα πλαίσια της παρούσας διατριβής, ο πίνακας σκέδασης υπολογίζεται αριθμητικά, με τη μέθοδο *εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών* [112]. Από το διανυσματικό θεώρημα Green, για μια κανονική επιφάνεια S_1 που περικλείει

έναν όγκο V_1 , εύκολα προκύπτει η παρακάτω έκφραση στην περίπτωση που το ένα διάνυσμα αντικατασταθεί από τανυστή δεύτερης τάξης, $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$

$$\int_{V_1} dV \left[\mathbf{a} \cdot (\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{B}}) - (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a}) \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{B}} \right] = - \int_{S_1} dS \left[(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \mathbf{a}) \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{B}} + (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{a}) \cdot (\nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{B}}) \right], \quad (2.21)$$

όπου $\hat{\mathbf{n}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα που δείχνει έξω από τον όγκο V_1 . Εφαρμόζοντας την Εξ. (2.21) στον όγκο $V_1 = V_{\text{EXT}}$ εκτός του σωματιδίου για το ολικό ηλεκτρικό πεδίο στην ίδια περιοχή, με $\mathbf{a} = \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) [= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r})]$ και $\overleftrightarrow{\mathbf{B}} = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$, όπου $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ η συνάρτηση Green στη βάση σφαιρικών κυμάτων, Εξ. (ε'.47), καταλήγουμε στην έκφραση

$$\begin{aligned} & \int_{V_{\text{EXT}}} d^3r \left\{ \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \cdot [\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)] - [\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \right\} \\ &= \left(- \int_{S_\infty} + \int_S \right) dS \left\{ [\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \right. \\ & \quad \left. + [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot [\nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)] \right\}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

όπου V_{EXT} ο χώρος εκτός του σωματιδίου που οριοθετείται από την επιφάνεια του σωματιδίου, S , και την επιφάνεια στο άπειρο, S_∞ , και $\hat{\mathbf{n}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο τοπικά στις επιφάνειες με κατεύθυνση προς τα έξω (σε σχέση με το σωματίδιο). Για το ολοκλήρωμα στο άπειρο ισχύει $\mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})$, εφόσον το εξερχόμενο κύμα μηδενίζεται στο άπειρο. Εφαρμόζοντας την Εξ. (2.21) σε όλο τον χώρο, για $\mathbf{a} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ και $\overleftrightarrow{\mathbf{B}} = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$, προκύπτει

$$\frac{\varepsilon\mu}{c^2} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}') = \int_{S_\infty} dS \left\{ [\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \mathbf{E}_0(\mathbf{r})] \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) + [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_0(\mathbf{r})] \cdot [\nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)] \right\}, \quad (2.23)$$

όπου εφαρμόσαμε επιπλέον την Εξ. (ε'.16). Έτσι, από την Εξ. (2.22) καταλήγουμε στη σχέση

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}') &, \quad \mathbf{r}' \in V_{\text{EXT}} \\ 0 &, \quad \mathbf{r}' \in V_{\text{INT}} \end{aligned} \right\} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}') + \int_S dS \left\{ i\omega\mu\mu_0 [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)c^2}{-\varepsilon\mu} \right. \\ \left. + [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot \left[\nabla \times \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)c^2}{-\varepsilon\mu} \right] \right\}, \quad (2.24)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (1.14) για να εισάγουμε το μαγνητικό πεδίο. Λόγω συνέχειας των εφαπτομενικών συνιστωσών στην επιφάνεια του σωματιδίου ισχύει

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Από την Εξ. (2.24) μέσω των (2.25), (ε'.47) και της ταυτότητας (Α'.1) προκύπτει

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}') = - \sum_L \mathbf{J}_L(\mathbf{r}') iq \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \frac{\mu}{\mu_1} [\nabla \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r})] \times \overline{\mathbf{H}}_L(\mathbf{r}) \right.$$

$$+\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \bar{\mathbf{H}}_{\text{L}}(\mathbf{r})] \} , \quad \text{για } \mathbf{r}' \in V_{\text{INT}} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}') &= \sum_{\text{L}} \mathbf{H}_{\text{L}}(\mathbf{r}') i q \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \frac{\mu}{\mu_1} [\nabla \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r})] \times \bar{\mathbf{J}}_{\text{L}}(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \bar{\mathbf{J}}_{\text{L}}(\mathbf{r})] \right\} , \quad \text{για } \mathbf{r}' \in V_{\text{EXT}} , \end{aligned} \quad (2.27)$$

όπου V_{INT} ο όγκος εντός του σωματιδίου, ενώ η παύλα στις $\bar{\mathbf{J}}_{\text{L}}$ και $\bar{\mathbf{H}}_{\text{L}}$ υποδηλώνει μιγαδική συζυγία που εφαρμόζεται μόνο στα γωνιακά τους τμήματα. Οι Εξ. (2.26) και (2.27) αποτελούν τη μέθοδο εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών, προσαρμοσμένη στον φορμαλισμό της μεθόδου LMS [93,94]. Ουσιαστικά η μέθοδος εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών 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. (2.26), και στη συνέχεια υπολογίζεται το σκεδαζόμενο κύμα συναρτήσει του πεδίου μέσα στον σκεδαστή μέσω της Εξ. (2.27). Συγκρίνοντας τις (2.26) και (2.27) με τις (2.1) και (2.2), και χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.3), προκύπτουν οι εξισώσεις για τα πλάτη των κυμάτων

$$a_{\text{L}}^0 = - \sum_{\text{L}'} Q_{\text{LL}'}^0 a_{\text{L}'}^{\text{in}} \quad (2.28)$$

και

$$a_{\text{L}}^+ = \sum_{\text{L}'} Q_{\text{LL}'}^+ a_{\text{L}'}^{\text{in}} , \quad (2.29)$$

όπου

$$Q_{\text{LL}'}^0 = i q \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \mathbf{J}_{\text{L}'}^1(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \bar{\mathbf{H}}_{\text{L}}(\mathbf{r})] - \frac{\mu}{\mu_1} \bar{\mathbf{H}}_{\text{L}}(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \mathbf{J}_{\text{L}'}^1(\mathbf{r})] \right\} \quad (2.30)$$

και

$$Q_{\text{LL}'}^+ = i q \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \mathbf{J}_{\text{L}'}^1(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \bar{\mathbf{J}}_{\text{L}}(\mathbf{r})] - \frac{\mu}{\mu_1} \bar{\mathbf{J}}_{\text{L}}(\mathbf{r}) \times [\nabla \times \mathbf{J}_{\text{L}'}^1(\mathbf{r})] \right\} . \quad (2.31)$$

Από την Εξ. (2.7), μέσω των (2.28) και (2.29), προκύπτει ότι ο πίνακας \mathbf{T} μπορεί να υπολογιστεί από τη λύση του συστήματος

$$\sum_{\text{L}''} T_{\text{LL}''} Q_{\text{L}''\text{L}'}^0 = -Q_{\text{LL}'}^+ . \quad (2.32)$$

Αν επιπλέον χρησιμοποιήσουμε τις Εξ. (1.56) και (1.14) μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} Q_{\text{E}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} &= \frac{q}{q_1} \mathcal{J}_{\text{H}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} - \frac{\mu}{\mu_1} \mathcal{J}_{\text{E}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} \\ Q_{\text{E}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} &= \frac{q}{q_1} \mathcal{J}_{\text{H}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} + \frac{\mu}{\mu_1} \mathcal{J}_{\text{E}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} \\ Q_{\text{H}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} &= -\frac{q}{q_1} \mathcal{J}_{\text{E}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} - \frac{\mu}{\mu_1} \mathcal{J}_{\text{H}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} \\ Q_{\text{H}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} &= -\frac{q}{q_1} \mathcal{J}_{\text{E}l m; \text{H}l' m'}^{0(+)} + \frac{\mu}{\mu_1} \mathcal{J}_{\text{H}l m; \text{E}l' m'}^{0(+)} , \end{aligned} \quad (2.33)$$

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

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{LL'}^0 &= qq_1 \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot [\mathbf{J}_{L'}^1(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{H}}_L(\mathbf{r})] \\ \mathcal{J}_{LL'}^+ &= qq_1 \int_S dS \hat{\mathbf{n}} \cdot [\mathbf{J}_{L'}^1(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{J}}_L(\mathbf{r})] .\end{aligned}\quad (2.34)$$

Εξάλλου, το διαφορικό γράφεται [112]

$$dS \hat{\mathbf{n}} = r^2 \sin \theta \left(\hat{\mathbf{r}} - \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial \theta} \hat{\boldsymbol{\theta}} - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial r}{\partial \phi} \hat{\boldsymbol{\phi}} \right) d\theta d\phi . \quad (2.35)$$

Αν και η ανάπτυξη του HM 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 \mathbf{T} . Ωστόσο, για την επίλυση της Εξ. (2.32) χρειάζεται να ληφθούν υπόψη στοιχεία πίνακα μέχρι $\ell_{\text{cut}} (\geq \ell_{\max})$. Το γεγονός ότι το ℓ_{cut} αυξάνεται σημαντικά καθώς το σχήμα του σωματιδίου αποκλίνει από τη σφαίρα σημαίνει ότι προκειμένου να υπολογιστούν με ακρίβεια τα στοιχεία του πίνακα \mathbf{T} δεδομένης διάστασης χρειάζεται ένας μεγάλος αριθμός στοιχείων των πίνακων \mathbf{Q}^0 και \mathbf{Q}^+ . Προφανώς, για σφαιρικά σωματίδια ισχύει $\ell_{\text{cut}} = \ell_{\max}$. Σημειώνεται ότι η Εξ. (2.32) δεν πρέπει να επιλύεται μέσω αντιστροφής του \mathbf{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 υπερχειλίσης [113].

Στην περίπτωση σωματιδίων κυλινδρικής συμμετρίας (ομάδα $D_{\infty h}$ [114]), ισχύει $\mathbf{r} = r(\theta) \hat{\mathbf{r}}$, με $r(\pi - \theta) = r(\theta)$ (βλ. Σχ. 2.1). Σε αυτή την περίπτωση, από την πρώτη των Εξ. (2.34), μέσω σχέσεων του Παραρτήματος Γ', καταλήγουμε στις εκφράσεις

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{E\ell m; E\ell' m'}^0 &= -\frac{2\pi i \delta_{mm'}}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} \left[1 - (-1)^{\ell+\ell'} \right] \int_0^1 d \cos \theta \frac{m}{\sin \theta} \\ &\times \left\{ [qr h_\ell^+(qr)]' [q_1 r j_{\ell'}(q_1 r)]' \frac{\partial [Y_{\ell m}(\theta) Y_{\ell' m}(\theta)]}{\partial \theta} \right. \\ &+ \left. \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial \theta} \left\{ \psi_{\ell'}^2 j_{\ell'}(q_1 r) [qr h_\ell^+(qr)]' + \psi_\ell^2 h_\ell^+(qr) [q_1 r j_{\ell'}(q_1 r)]' \right\} Y_{\ell m}(\theta) Y_{\ell' m}(\theta) \right\} \\ \mathcal{J}_{E\ell m; H\ell' m'}^0 &= -\frac{2\pi i \delta_{mm'}}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} \left[1 + (-1)^{\ell+\ell'} \right] \int_0^1 d \cos \theta q_1 r j_{\ell'}(q_1 r) \\ &\times \left\{ [qr h_\ell^+(qr)]' \left[\frac{m^2}{\sin^2 \theta} Y_{\ell' m}(\theta) Y_{\ell m}(\theta) + \frac{\partial Y_{\ell' m}(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta)}{\partial \theta} \right] \right. \\ &+ \left. \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial \theta} \psi_\ell^2 h_\ell^+(qr) Y_{\ell m}(\theta) \frac{\partial Y_{\ell' m}(\theta)}{\partial \theta} \right\} \\ \mathcal{J}_{H\ell m; E\ell' m'}^0 &= -\frac{2\pi i \delta_{mm'}}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} \left[1 + (-1)^{\ell+\ell'} \right] \int_0^1 d \cos \theta qr h_\ell^+(qr)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ [q_1 r j_{\ell'}(q_1 r)]' \left[\frac{m^2}{\sin^2 \theta} Y_{\ell' m}(\theta) Y_{\ell m}(\theta) + \frac{\partial Y_{\ell' m}(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta)}{\partial \theta} \right] \right. \\
& \left. + \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial \theta} \psi_{\ell'}^2 j_{\ell}(q_1 r) Y_{\ell' m}(\theta) \frac{\partial Y_{\ell m}(\theta)}{\partial \theta} \right\} \\
\mathcal{J}_{H\ell m; H\ell' m'}^0 &= - \frac{2\pi i \delta_{mm'}}{\psi_{\ell} \psi_{\ell'}} \frac{[1 - (-1)^{\ell+\ell'}]}{\int_0^1 d \cos \theta} \frac{m}{\sin \theta} \\
& \times q r h_{\ell}^+(q r) q_1 r j_{\ell'}(q_1 r) \frac{\partial [Y_{\ell m}(\theta) Y_{\ell' m}(\theta)]}{\partial \theta}, \quad (2.36)
\end{aligned}$$

όπου ο τόνος στις αγκύλες υποδηλώνει παραγωγή ως προς το όρισμα (qr ή $q_1 r$), $Y_{\ell m}(\theta) \equiv Y_{\ell m}(\theta, \phi = 0)$, 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 . Οι \mathcal{J}_{LL}^+ , δίνονται από τις παραπάνω εκφράσεις αντικαθιστώντας τις $h_{\ell}^+(qr)$ με τις $j_{\ell}(qr)$. Αξίζει να σημειωθεί ότι, για λόγους αριθμητικής ευστάθειας, οι υπολογισμοί βάσει των Εξ. (2.36) πρέπει να γίνονται χρησιμοποιώντας τις ταυτότητες $\frac{m}{\sin \theta} Y_{\ell m}(\theta) = -\alpha_{\ell}^m \cos \theta Y_{\ell m+1}(\theta) + m \sin \theta Y_{\ell m}(\theta) - \alpha_{\ell}^{-m} \cos \theta Y_{\ell m-1}(\theta)$ και $\frac{\partial}{\partial \theta} Y_{\ell m}(\theta) = \alpha_{\ell}^m Y_{\ell m+1}(\theta) - \alpha_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\theta)$ (βλ. και Παράρτημα Γ').

Ο παράγοντας $\delta_{mm'}$ στις Εξ. (2.36) σημαίνει ότι η Εξ. (2.32) σπάει σε ανεξάρτητα συστήματα εξισώσεων για κάθε τιμή του m . Επιπλέον, εξαιτίας του παράγοντα $[1 \pm (-1)^{\ell+\ell'}]$ στις Εξ. (2.36), τα στοιχεία των πινάκων \mathbf{Q}^0 και \mathbf{Q}^+ για $PP' = EH, HE$ ή EE, HH είναι ταυτοτικά μηδέν εάν $\ell + \ell'$ είναι ένας άρτιος ή περιττός ακέραιος, αντίστοιχα, σύμφωνα με τις Εξ. (2.33). Γι' αυτό καθένα από τα προαναφερθέντα συστήματα εξισώσεων μπορεί να αναχθεί περαιτέρω σε δύο ανεξάρτητα υποσυστήματα. Σημειώνεται επίσης ότι δεν χρειάζεται να υπολογιστούν τα $Q_{P\ell m; P'\ell' m}^{0(+)}$ για αρνητικές τιμές του m διότι, σύμφωνα με τις Εξ. (2.33) και (2.36), $Q_{P\ell-m; P'\ell'-m}^{0(+)} = (1 - 2\delta_{PP'}) Q_{P\ell m; P'\ell' m}^{0(+)}$.

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 πίνακες 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

$$T_{P\ell m; P'\ell' m'} = \sum_{m_1=-\ell}^{\ell} \sum_{m'_1=-\ell'}^{\ell'} D_{mm_1}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) T_{P\ell m_1; P'\ell' m'_1}^0 D_{m'_1 m'}^{\ell'}(-\gamma, -\beta, -\alpha), \quad (2.37)$$

όπου ο \mathbf{T}^0 αναφέρεται στο ενδογενές σύστημα συντεταγμένων του σωματιδίου. Στην παραπάνω εξίσωση $D_{mm_1}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha) d_{mm_1}^{\ell}(\beta) \exp(-im_1\gamma)$, όπου η $d_{mm_1}^{\ell}$ είναι η συνάρτηση Wigner [112]

$$\begin{aligned}
d_{mm_1}^{\ell}(\beta) &= \sqrt{(\ell+m)!(\ell-m)!(\ell+m_1)!(\ell-m_1)!} \\
&\times \sum_k (-1)^k \frac{[\cos(\beta/2)]^{2\ell-2k+m-m_1} [\sin(\beta/2)]^{2k-m+m_1}}{k!(\ell+m-k)!(\ell-m_1-k)!(m_1-m+k)!}, \quad (2.38)
\end{aligned}$$

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

Η περιγραφή της σκέδασης από ένα σωματίδιο γίνεται συνήθως με όρους ενέργειας που σκεδάζεται ή απορροφάται από το σωματίδιο. Η ενεργός διατομή σκέδασης (απορρόφησης) εκφράζει τη ροή ενέργειας που σκεδάζεται (απορροφάται) από τον σχεδαστή προς την προσπίπτουσα ροή ενέργειας του κύματος ανά μονάδα επιφάνειας. Η προσπίπτουσα ροή ενέργειας εκφράζεται από τη συνιστώσα του διανύσματος Poynting κατά τη διεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας. Για ένα μονοχρωματικό κύμα, η μέση τιμή του διανύσματος Poynting σε μία περίοδο γράφεται

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})] , \quad (2.39)$$

ενώ η μέση τιμή της ισχύος που διέρχεται από μια επιφάνεια S' μπορεί να γραφεί

$$P = \int_{S'} dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle . \quad (2.40)$$

Για το επίπεδο προσπίπτον κύμα η ροή ενέργειας κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης γράφεται [83]

$$\langle \mathbf{S}_0 \rangle \cdot \hat{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\mu\mu_0}} |\mathbf{E}_0|^2 . \quad (2.41)$$

Η ισχύς της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας προκύπτει από την ολοκλήρωση του διανύσματος Poynting για το σκεδαζόμενο πεδίο πάνω στην επιφάνεια S' σφαίρας που περιβάλλει το σωματίδιο. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (2.2), (1.14) και τα Παραρτήματα Β' και Γ' προκύπτει

$$P_{\text{sc}} = \frac{1}{2} \text{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{\text{sc}}^*(\mathbf{r})] = \frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_L |a_L^+|^2 . \quad (2.42)$$

Λόγω διατήρησης της ενέργειας, η ισχύς που απορροφάται από το σωματίδιο θα ισούται με το αντίθετο της ροής ενέργειας που εκπέμπεται συνολικά από την επιφάνεια S' . Η ενέργεια αυτή γράφεται

$$P_{\text{out}} = \frac{1}{2} \text{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{\text{out}}^*(\mathbf{r})] = P_0 + P_{\text{sc}} - P_{\text{ext}} , \quad (2.43)$$

όπου

$$P_0 = \frac{1}{2} \text{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_0^*(\mathbf{r})] = 0 \quad (2.44)$$

και

$$\begin{aligned} P_{\text{ext}} &= -\frac{1}{2} \text{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{\text{sc}}^*(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_0^*(\mathbf{r})] = \\ &= -\frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_L \text{Re} (a_L^+ a_L^{0*}) \end{aligned} \quad (2.45)$$

η ενέργεια που σχετίζεται με την αλληλεπίδραση του προσπίπτοντος με το σκεδαζόμενο πεδίο και ονομάζεται ενέργεια απόσβεσης. Λόγω της αρχής διατήρησης της ενέργειας θα ισχύει

$P_{\text{abs}} = P_{\text{ext}} - P_{\text{sc}}$, δηλαδή η ενέργεια απόσβεσης εκφράζει τη συνολική ενέργεια που παρέχεται από την πηγή του εισερχόμενου κύματος στο σωματίδιο. Από τις Εξ. (2.7) και (1.59) προκύπτει

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{sc}} &= \frac{1}{q^2} \sum_{\text{L}} \left| \sum_{\text{L}'} T_{\text{LL}'} A_{\text{L}';\text{p}}^0 \right|^2 \\ \sigma_{\text{ext}} &= -\frac{1}{q^2} \text{Re} \sum_{\text{L}} (A_{\text{L};\text{p}}^0)^* \sum_{\text{L}'} T_{\text{LL}'} A_{\text{L}';\text{p}}^0 ,\end{aligned}\quad (2.46)$$

όπου ο δείκτης p εκφράζει την πόλωση του προσπίπτοντος κύματος [$p = 1, 2$ για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα], ενώ η ενεργός διατομή απορρόφησης είναι $\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{ext}} - \sigma_{\text{sc}}$. Είναι ξεκάθαρο ότι, εκτός από την περίπτωση σφαιρικών σκεδαστών, η ενεργός διατομή εξαρτάται από την πόλωση και τη διεύθυνση διάδοσης του προσπίπτοντος κύματος. Για σκεδαστές με σφαιρική συμμετρία (ακτίνας S), οι Εξ. (2.46) απλοποιούνται στις εκφράσεις

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{sc}} &= \frac{2}{(qS)^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left(|T_{E\ell}|^2 + |T_{H\ell}|^2 \right) \\ \sigma_{\text{ext}} &= -\frac{2}{(qS)^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \text{Re} (T_{E\ell} + T_{H\ell}) .\end{aligned}\quad (2.47)$$

Οι ενεργές διατομές σκέδασης και απορρόφησης εμφανίζουν συντονισμούς στις συχνότητες των ιδιοκαταστάσεων του σωματιδίου, όπως θα δούμε και σε συγκεκριμένα παραδείγματα. Οι καταστάσεις αυτές είναι μη μηδενικές λύσεις του HM πεδίου απουσία εξωτερικής διέγερσης. Μπορούν να προκύψουν από τις λύσεις της $\mathbf{Q}^0 \mathbf{a}^{\text{in}} = \mathbf{0}$, οι οποίες αντιστοιχούν σε, εν γένει μιγαδικές, ιδιοσυχνότητες $\omega_i - i\gamma_i$ στο κάτω μιγαδικό ημιπίπεδο, με αντίστοιχες ιδιολύσεις \mathbf{a}_i^{in} , ενώ τα πλάτη του εξερχόμενου κύματος θα γράφονται σε μορφή διανύσματος ως $\mathbf{a}_i^+ = \mathbf{Q}_i^+ \mathbf{a}_i^{\text{in}}$. Ισοδύναμα, οι λύσεις αυτές προκύπτουν μέσω της $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{a}^+ = \mathbf{0}$. Εισάγοντας τη μορφή της λύσης στις εκφράσεις της ενεργού διατομής σκέδασης προκύπτει ότι η ενεργός διατομή σκέδασης εμφανίζει, για $\gamma_i \ll \omega_i$, κορυφές συντονισμού στις θέσεις ω_i .

2.2 Θεωρία πολλαπλής σκέδασης

Θα θεωρήσουμε τώρα ένα σύστημα από μη αλληλεπικαλυπτόμενους σκεδαστές, σε ομοιογενές περιβάλλον, διατεταγμένους - περιοδικά ή τυχαία - σε θέσεις \mathbf{R}_n . Χρησιμοποιώντας τις μαθηματικές ταυτότητες [92]

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}). \quad (2.48)$$

$$\frac{\exp(iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(qr_{<}) h_\ell^+(qr_{>}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}'), \quad (2.49)$$

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 [115]:

$$h_{\ell'}^+(qr_{n'}) Y_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) = \sum_{\ell m} G_{\ell' m'; \ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (r_n < R_{nn'}), \quad (2.50)$$

όπου $\mathbf{R}_{nn'} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$, $\mathbf{r}_{n'} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}$ και $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$. Οι συντελεστές $G_{\ell m; \ell' m'}$ στην παραπάνω έκφραση δίνονται από την

$$G_{\ell m; \ell' m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) = 4\pi \sum_{\ell'' m''} (-1)^{(\ell - \ell' - \ell'')/2} (-1)^{m' + m''} B_{\ell m}(\ell'' m''; \ell' m') \times h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell'' - m''}(\widehat{\mathbf{R}}_{nn'}) , \quad (2.51)$$

με

$$B_{\ell m}(\ell'' m''; \ell' m') = \int d\Omega Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' - m'}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{\ell'' m''}(\widehat{\mathbf{r}}) , \quad (2.52)$$

όπου με $d\Omega$ συμβολίζουμε την ολοκλήρωση στη στερεά γωνία. Αντίστοιχα, για τα εξερχόμενα διανυσματικά σφαιρικά κύματα μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_L \Omega_{LL'}^{nn'} \mathbf{J}_L(\mathbf{r}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) . \quad (2.53)$$

Για τον υπολογισμό του πίνακα Ω προχωράμε ως εξής: Από τη σχέση που συνδέει δύο εγκάρσια σφαιρικά κύματα [Εξ. (1.56)] μπορούμε, δρώντας με τον τελεστή $(i/q)\nabla \times$ στην Εξ. (2.53) για $P = H$ και συγκρίνοντας με την αντίστοιχη για $P = E$ να δούμε ότι $\Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'}$ και $\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'}$. Συνεπώς, αρκεί ο προσδιορισμός των $\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'}$, $\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'}$. Εύκολα φαίνεται ότι

$$\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \frac{\int d\Omega_{\widehat{\mathbf{r}}_n} \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}^*(\widehat{\mathbf{r}}_n)}{j_{\ell}(qr_n)} \quad (2.54)$$

αν λάβουμε υπόψη τις Εξ. (Γ'.33), (Γ'.37) και (Γ'.38), καθώς και ότι

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\frac{qr_n \int d\Omega_{\widehat{\mathbf{r}}_n} \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \widehat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell m}^*(\widehat{\mathbf{r}}_n)}{\psi_{\ell} j_{\ell}(qr_n)} . \quad (2.55)$$

Στις παραπάνω εκφράσεις, το κύμα $\mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'})$, που εξέρχεται από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$, αναπτύσσεται σε βαθμωτά εισερχόμενα κύματα ως προς τις διάφορες θέσεις \mathbf{R}_n . Με τη βοήθεια της Εξ. (2.50) και της έκφρασης των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών σε καρτεσιανές συντεταγμένες, Εξ. (Γ'.27), παίρνουμε

$$\mathbf{H}_{E\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) = \frac{1}{\psi_{\ell'}} \sum_{\ell'' m''} \left[\alpha_{\ell'}^{-m'} G_{\ell' m' - 1; \ell'' m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q) (\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}}) + m' G_{\ell' m'; \ell'' m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \widehat{\mathbf{z}} + \alpha_{\ell'}^{m'} G_{\ell' m' + 1; \ell'' m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q) (\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}}) \right] j_{\ell''}(qr_n) Y_{\ell'' m''}(\widehat{\mathbf{r}}_n) . \quad (2.56)$$

με το α_{ℓ}^m να δίνεται από την Εξ. (1.64). Από την Εξ. (2.54), μέσω της (2.56), εύκολα καταλήγουμε στην

$$\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \frac{1}{\psi_{\ell} \psi_{\ell'}} \left[2\alpha_{\ell}^{-m} \alpha_{\ell'}^{-m'} G_{\ell' m' - 1; \ell m - 1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + m m' G_{\ell' m'; \ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + 2\alpha_{\ell}^m \alpha_{\ell'}^{m'} G_{\ell' m' + 1; \ell m + 1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \right] . \quad (2.57)$$

Επιπλέον, από την Εξ. (2.55), μέσω των (2.56) και (Γ'.42), καταλήγουμε στην έκφραση

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\frac{1}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} \frac{qr_n}{j_\ell(qr_n)} \left[j_{\ell+1}(qr_n) \mathcal{F}_{\ell' m'; \ell m}^+ + j_{\ell-1}(qr_n) \mathcal{F}_{\ell' m'; \ell m}^- \right], \quad (2.58)$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^+ &= 2\alpha_\ell^{-m} \gamma_{\ell'+1}^{-m'+1} G_{\ell m-1; \ell'+1 m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + m \zeta_{\ell'+1}^{m'} G_{\ell m; \ell'+1 m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \\ &\quad - 2\alpha_\ell^m \gamma_{\ell'+1}^{m'+1} G_{\ell m+1; \ell'+1 m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \\ \mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^- &= -2\alpha_\ell^{-m} \gamma_{\ell'}^{m'} G_{\ell m-1; \ell'-1 m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + m \zeta_{\ell'}^{m'} G_{\ell m; \ell'-1 m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \\ &\quad + 2\alpha_\ell^m \gamma_{\ell'}^{-m'} G_{\ell m+1; \ell'-1 m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \end{aligned} \quad (2.59)$$

και

$$\gamma_\ell^m = \frac{[(\ell+m)(\ell+m-1)]^{1/2}}{2[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}, \quad (2.60)$$

$$\zeta_\ell^m = \frac{[(\ell+m)(\ell-m)]^{1/2}}{[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}. \quad (2.61)$$

Από τις Εξ. (2.51), (2.52) και (2.59) έχουμε

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^+ - \mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^- &= 4\pi \sum_{\ell'' m''} i^{\ell-\ell'-\ell''-1} (-1)^{m'+m''-1} h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell''-m''}(\widehat{\mathbf{R}}_{nn'}) \\ &\times \int d\Omega Y_{\ell'' m''}(\widehat{\mathbf{r}}) \left\{ 2\alpha_\ell^{-m} Y_{\ell m-1}(\widehat{\mathbf{r}}) \left[\gamma_{\ell'+1}^{-m'+1} Y_{\ell'+1-m'+1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'+1}(\widehat{\mathbf{r}}) \right] \right. \\ &\quad - m Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}}) \left[\zeta_{\ell'+1}^{m'} Y_{\ell'+1-m'}(\widehat{\mathbf{r}}) + \zeta_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'}(\widehat{\mathbf{r}}) \right] \\ &\quad \left. - 2\alpha_\ell^m Y_{\ell m+1}(\widehat{\mathbf{r}}) \left[\gamma_{\ell'+1}^{m'+1} Y_{\ell'+1-m'-1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{-m'} Y_{\ell'-1-m'-1}(\widehat{\mathbf{r}}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

και με τη βοήθεια των Εξ. (Γ'.12), (Γ'.13), (Γ'.14) και (Γ'.15), εύκολα προκύπτει η

$$\mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^+ = \mathcal{F}_{\ell m; \ell' m'}^-. \quad (2.63)$$

Έτσι, από την Εξ. (2.58), μέσω της (2.63) και της (Β'.19) προκύπτει

$$\begin{aligned} \Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'} &= -\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \frac{2\ell+1}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} \left[-2\alpha_{\ell'}^{-m'} \gamma_\ell^m G_{\ell' m'-1; \ell-1 m-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \right. \\ &\quad \left. + m' \zeta_\ell^m G_{\ell' m'; \ell-1 m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + 2\alpha_{\ell'}^{m'} \gamma_\ell^{-m} G_{\ell' m'+1; \ell-1 m+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \right]. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Σημειώνουμε ότι για $n = n'$ εξ ορισμού $\Omega_{LL}^{nn'} = 0$.

Έτσι, ένα εξερχόμενο κύμα γύρω από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$, $\sum_{L'} b_{L'}^{+n'} \mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'})$, μπορεί να γραφεί ως εισερχόμενο γύρω από τη θέση \mathbf{R}_n , $\sum_L b_L'^n(n') \mathbf{J}_L(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$, όπου

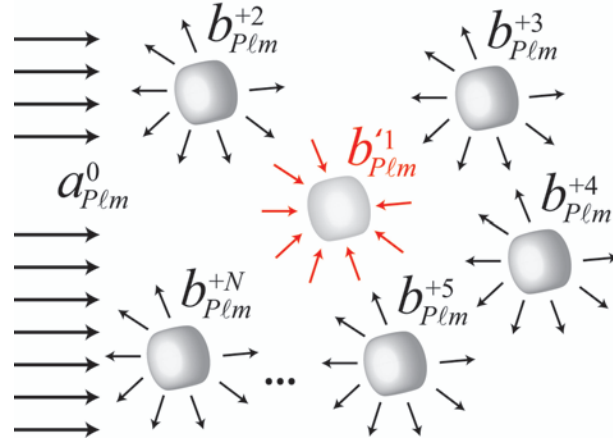
$$b_L'^n(n') = \sum_{L'} \Omega_{LL'}^{nn'} b_{L'}^{+n'}. \quad (2.65)$$

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

$$b_L^{+n} = \sum_{L'} T_{LL'}^n \left[a_{L'}^{0n} + \sum_{n' \neq n} b_{L'}^{+n'} \right], \quad (2.66)$$

με $T_{LL'}^n$ τα στοιχεία του πίνακα σχεδάσης (βλ. Εδ. 2.1) του σωματιδίου στη θέση \mathbf{R}_n , και $a_{L'}^{0n}$ τους συντελεστές πολυπολικής ανάπτυξης γύρω από τη θέση \mathbf{R}_n ενός εξωτερικά προσπίπτοντος κύματος, όπως δείχνουμε σχηματικά στο Σχ. 2.2. Από τις Εξ. (2.65) και (2.66) θα έχουμε

$$\sum_{n'L'} \left[\delta_{nn'} \delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''}^n \Omega_{L''L'}^{nn'} \right] b_{L'}^{+n'} = \sum_{L'} T_{LL'}^n a_{L'}^{0n}. \quad (2.67)$$



Σχήμα 2.2: Το κύμα που προσπίπτει σε έναν σχεδαστή ('1') ισούται με το άθροισμα των κυμάτων που εξέρχονται από όλους τους υπόλοιπους σχεδαστές συν το εξωτερικά προσπίπτον κύμα.

Αν έχουμε μια περιοδική δομή, που ορίζεται από τα διανύσματα πλέγματος Bravais, \mathbf{R}_λ , και τα μη θεμελιώδη διανύσματα \mathbf{t}_α που ορίζουν τις θέσεις των σχεδαστών (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. (2.67), κι εφόσον αυτές ικανοποιούν το θεώρημα Bloch, $b_{L'}^{+\lambda'\alpha'} = \exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{R}_{\lambda'} - \mathbf{R}_\lambda]) b_{L'}^{+\lambda\alpha'}$, παίρνουμε την καταστατική εξίσωση

$$\det \left[\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''}^\alpha \Omega_{L''L'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \right] = 0, \quad (2.68)$$

όπου

$$\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda'} \Omega_{LL'}^{nn'} \exp(-i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}]), \quad (2.69)$$

το οποίο δεν εξαρτάται από το λ , και

$$\Omega_{LL'}^{nn'} = \frac{1}{v} \int_{\text{ZB}} d^3q \exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}]) \Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}), \quad (2.70)$$

με v τον όγκο της πρώτης ζώνης Brillouin (ZB). Τόσο τα $T_{LL'}^\alpha$, όσο και τα $\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ είναι συναρτήσεις της συχνότητας. Όμως τα $T_{LL'}^\alpha$ εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες του ενός σκεδαστή, ενώ τα $\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ εξαρτώνται μόνο από τη γεωμετρία και τα ονομάζουμε *σταθερές δομής*, υιοθετώντας την ορολογία της μεθόδου KKR [116,117] 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 κατά Ewald [118], διότι το πλεγματοειδές άθροισμα στον ευθύ χώρο συγκλίνει συνήθως αργά. Εξαιρέση 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 $\Omega_{LL'}^{nn'}$ 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 η Εξ. (2.68) περιλαμβάνει πίνακες άπειρων διαστάσεων, σε πραγματικούς υπολογισμούς συγκλίνει γρήγορα 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 εν μέρει και η αποτελεσματικότητα των μεθόδων πολλαπλής σκέδασης.

2.3 Διδιάστατη περιοδική δομή

Στο υπόλοιπο της διατριβής θα εξετάσουμε δομές που παράγονται 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 πλεγματοειδείς θέσεις ενός δεδομένου 2Δ πλέγματος που ορίζεται από τα διανύσματα

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2, \quad (2.71)$$

με $n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, και με $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ τα θεμελιώδη διανύσματα στο επίπεδο $x-y$. Ορίζουμε το αντίστοιχο 2Δ αντίστροφο πλέγμα ως εξής:

$$\mathbf{g} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2, \quad (2.72)$$

με $m_1, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, και με τα θεμελιώδη διανύσματα του αντίστροφου πλέγματος, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$, να ορίζονται από τις

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2. \quad (2.73)$$

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 επιπέδου προσπίπτοντος κύματος ως

$$\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}' , \quad (2.74)$$

όπου \mathbf{k}_{\parallel} η παράλληλη στο επίπεδο και ανηγμένη στην επιφανειακή ζώνη Brillouin (EZB) συνιστώσα του κυματανύσματος, και \mathbf{g}' κάποιο κατάλληλο διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος (2.72). Σημειώνουμε ότι, με βάση τις Εξ. (2.73) και (2.74), $\exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)$. Στην πράξη, έχοντας δεδομένο το \mathbf{q}_{\parallel} , μπορεί κανείς με διαδοχικές αφαιρέσεις διαφόρων 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 EZB.

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

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'} \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) , \quad (2.75)$$

με $s' = +(-)$ για πρόσπτωση από αριστερά (δεξιά) του επιπέδου των σχεδαστών. Λαμβάνοντας υπόψη την Εξ. (2.74) γράφουμε

$$\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{\pm} \equiv \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}' \pm \left[q^2 - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}')^2 \right]^{1/2} \hat{\mathbf{z}} , \quad (2.76)$$

όπου $q = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}/c$ το μέτρο του κυματανύσματος στο μέσο που περιβάλλει τους σχεδαστές. Στην Εξ. (2.75), τα $\hat{\mathbf{e}}_{p'}$ αντιστοιχούν στην πολική ($p' = 1$, πόλωση TM) ή την αζιμουθιακή ($p' = 2$, πόλωση TE) συνιστώσα του πεδίου, οι οποίες προφανώς είναι κάθετες στο $\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}$. Με τον ίδιο τρόπο ορίζουμε, για δεδομένα ω και \mathbf{k}_{\parallel} , το κυματόνυσμα $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ και τα αντίστοιχα $\hat{\mathbf{e}}_p$ για οποιοδήποτε \mathbf{g} . Όταν $(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 > q^2$ το αντίστοιχο κύμα φθίνει εκθετικά στα δεξιά του επιπέδου για $s = +$, και στα αριστερά για $s = -$, και τα αντίστοιχα μοναδιαία διανύσματα $\hat{\mathbf{e}}_p$ γίνονται μιγαδικά. Πράγματι, τα $\hat{\mathbf{e}}_p$ ορίζονται σε καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων ως

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= \cos\theta \cos\phi \hat{\mathbf{x}} + \cos\theta \sin\phi \hat{\mathbf{y}} - \sin\theta \hat{\mathbf{z}} , \\ \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= -\sin\phi \hat{\mathbf{x}} + \cos\phi \hat{\mathbf{y}} , \end{aligned} \quad (2.77)$$

με θ και ϕ να δηλώνουν τις γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ (βλ. και Σχ. 1.1). Σημειώνουμε ότι η συνιστώσα z του $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$, $K_{\mathbf{g}z}^s$, είναι πραγματική εάν $(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 < q^2$ και μιγαδική εάν $(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 > q^2$. Στην τελευταία περίπτωση τα $\cos\theta$ και $\sin\theta$ στην Εξ. (2.77) αντικαθίστανται από τα $K_{\mathbf{g}z}^s/q$ και $|\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}|/q$, αντίστοιχα, με συνέπεια το $\hat{\mathbf{e}}_1$ να γίνεται μιγαδικό.

Για ένα προσπίπτον στο επίπεδο των σχεδαστών κύμα της μορφής (2.75), το σχεδασζόμενο κύμα θα γράφεται ως άθροισμα εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων με κέντρα τις θέσεις \mathbf{R}_n των σχεδαστών του επιπέδου, το καθένα από τα οποία θα διαφέρει από το σχεδασζόμενο από τον κεντρικό σχεδαστή ($\mathbf{R}_n = \mathbf{0}$) κύμα μόνο κατά τον φασικό παράγοντα $\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)$, εξαιτίας της 2Δ περιοδικότητας της δομής. Έτσι, γράφουμε

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) \sum_{\mathbf{L}} b_{\mathbf{L}}^+ \mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_n) , \quad (2.78)$$

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. (2.73).

Οι συντελεστές b_L^+ , που σχετίζονται με το σχεδασζόμενο από τον κεντρικό σχεδαστή κύμα, προσδιορίζονται από το ολικό προσπίπτον σε αυτόν κύμα, το οποίο συνίσταται από το προσπίπτον επίπεδο κύμα και από το άθροισμα των σχεδασζόμενων από όλους τους άλλους σχεδαστές του επιπέδου κυμάτων, $\mathbf{E}'_{sc}(\mathbf{r})$. Αυτό μπορεί να βρεθεί από το $\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r})$ αφαιρώντας από την Εξ. (2.78) τον όρο που αντιστοιχεί στο $\mathbf{R}_n = \mathbf{0}$. Από την άλλη, το $\mathbf{E}'_{sc}(\mathbf{r})$ μπορεί να αναπτυχθεί σε άθροισμα σφαιρικών κυμάτων με κέντρο την αρχή των συντεταγμένων

$$\mathbf{E}'_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_L b'_L \mathbf{J}_L(\mathbf{r}), \quad (2.79)$$

με τους συντελεστές b'_L να δίνονται από τη σχέση

$$b'_L = \sum_{L'} \Omega_{LL'}(\mathbf{k}_{\parallel}) b_{L'}^+. \quad (2.80)$$

Τα $\Omega_{LL'}$ δεν είναι τίποτε άλλο παρά ο μετασχηματισμός Fourier¹ για $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel}$ των διαδοτών $\Omega_{LL'}^{nn'}$ [Εξ. (2.70)] που, θυμίζουμε, εξαρτώνται από τη γεωμετρία του επιπέδου [βλ. Εξ. (2.71)] και, μέσω του q , από τη συχνότητα και τα οπτικά χαρακτηριστικά του μέσου που περιβάλλει τους σχεδαστές, ενώ δεν εξαρτώνται από την επιλογή του μεμονωμένου σχεδαστή. Ορίζοντας

$$Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \equiv \sum_{\mathbf{R}_n \neq \mathbf{0}} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) G_{\ell m; \ell' m'}(-\mathbf{R}_n; q), \quad (2.81)$$

τον μετασχηματισμό Fourier των $G_{\ell m; \ell' m'}(-\mathbf{R}_n; q)$ [Εξ. (2.51) με $\mathbf{R}_{nn'} \rightarrow -\mathbf{R}_n$], και με τη βοήθεια των Εξ. (2.57) και (2.64), παίρνουμε για τα μη μηδενικά στοιχεία του Ω

$$\begin{aligned} \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \Omega_{E\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\psi_{\ell} \psi_{\ell'}} \left[2\alpha_{\ell}^{-m} \alpha_{\ell'}^{-m'} Z_{\ell' m' - 1}^{\ell m - 1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. + m m' Z_{\ell' m'}^{\ell m}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) + 2\alpha_{\ell}^m \alpha_{\ell'}^{m'} Z_{\ell' m' + 1}^{\ell m + 1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right], \\ \Omega_{H\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= -\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{2\ell + 1}{\psi_{\ell} \psi_{\ell'}} \left[-2\alpha_{\ell'}^{-m'} \gamma_{\ell}^m Z_{\ell' m' - 1}^{\ell - 1 m - 1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. + m' \zeta_{\ell}^m Z_{\ell' m'}^{\ell - 1 m}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) + 2\alpha_{\ell'}^{m'} \gamma_{\ell}^{-m} Z_{\ell' m' + 1}^{\ell - 1 m + 1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right], \end{aligned} \quad (2.82)$$

με τα ψ_{ℓ} , α_{ℓ}^m , γ_{ℓ}^m , ζ_{ℓ}^m να δίνονται από τις Εξ. (1.63), (1.64), (2.60) και (2.61), αντίστοιχα. Ο υπολογισμός του πίνακα Ω ανάγεται στον υπολογισμό του πίνακα \mathbf{Z} , που είναι μια ποσότητα γνωστή από τη θεωρία περίθλασης ηλεκτρονίων χαμηλής ενέργειας (Low Energy Electron Diffraction, LEED). Ο αριθμητικός υπολογισμός του γίνεται με χρήση τεχνικών Ewald [119, 120] ή με απευθείας άθροιση στο ευθύ πλέγμα σε περιπτώσεις που αυτή συγκλίνει γρήγορα (βλ. σχετική συζήτηση στην τελευταία παράγραφο του Εδ. 2.2). Επιπλέον, η ακόλουθη ιδιότητα των $Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel})$ [120]

$$Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad \text{εκτός αν } \ell + m + \ell' + m' : \text{ άρτιος}, \quad (2.83)$$

¹ Από την Εξ. (2.69), παραλείποντας τους δείκτες α , α' , ταυτίζοντας το λ με το n αφού έχουμε έναν σχεδαστή ανά πλεγματική θέση, και αντιστοιχώντας το $\mathbf{R}_{nn'}$ στο $-\mathbf{R}_n$.

διευκολύνει ακόμη περισσότερο τους υπολογισμούς. Από την Εξ. (2.83) μπορεί κανείς να συνάγει αντίστοιχες ιδιότητες για τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{\Omega}$. Αν αποδώσουμε στον δείκτη P τις αχέραιες τιμές 1 και 2 αντί για τα σύμβολα E και H , αντίστοιχα, προκύπτει

$$\Omega_{P\ell m; P'\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad \text{εκτός αν } P + \ell + m + P' + \ell' + m' : \text{άρτιος}, \quad (2.84)$$

Οι συντελεστές b_L^+ , που περιγράφουν το σχεδαζόμενο από τον σχεδαστή στην αρχή των συντεταγμένων κύμα, δίνονται από τις

$$b_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} (a_{L'}^0 + b_{L'}'). \quad (2.85)$$

Οι συντελεστές στο δεξιό μέλος της Εξ. (2.85) περιγράφουν το ολικό προσπίπτον στον κεντρικό σχεδαστή κύμα. Οι a_L^0 προκύπτουν από το προσπίπτον επίπεδο κύμα (2.75) μέσω της Εξ. (1.59), και οι b_L' από το πεδίο που ορίζεται στην Εξ. (2.79). Συνδυάζοντας τις Εξ. (2.80) και (2.85), παίρνουμε

$$\sum_{L'} \left[\delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''} \Omega_{L''L'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] b_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} a_{L'}^0. \quad (2.86)$$

Η Εξ. (2.86) προσδιορίζει τους συντελεστές b_L^+ του σχεδαζόμενου από το επίπεδο των σχεδαστών κύματος, Εξ. (2.78), συναρτήσεως των συντελεστών a_L^0 του προσπίπτοντος. Με βάση την Εξ. (1.59) γράφουμε τους a_L^0 στη μορφή

$$a_L^0 = A_{L;p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}) [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'}, \quad (2.87)$$

με τα \mathbf{A}_L^0 να δίνονται από τις Εξ. (1.61) και (1.62). Εξαιτίας της γραμμικότητας των Εξ. (2.86) οι συντελεστές b_L^+ μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$b_L^+ = B_{L;p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}) [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'}, \quad (2.88)$$

και έτσι το σύστημα των (2.86) ανάγεται στις

$$\sum_{L'} \left[\delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''} \Omega_{L''L'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] B_{L;p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}) = \sum_{L'} T_{LL'} A_{L;p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}). \quad (2.89)$$

Θυμίζουμε ότι οι s' , p' , και \mathbf{g}' είναι παράμετροι που χαρακτηρίζουν το προσπίπτον κύμα. Οι Εξ. (2.89) 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 αναπτάγματα στην αναπαράσταση των σφαιρικών κυμάτων μέχρι αυτή την τιμή. Έτσι, η διάσταση του συστήματος γίνεται $2\ell_{\text{max}}(\ell_{\text{max}} + 2)$. Αν επιπλέον χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα (2.84) των $\Omega_{LL'}$, η οποία ισχύει και για τα στοιχεία $T_{LL'}$ στην περίπτωση σχεδαστών κυλινδρικής συμμετρίας, το σύστημα ανάγεται σε δύο ανεξάρτητα συστήματα

$$\sum_{o'} \left[\delta_{oo'} - \sum_{o''} T_{oo''} \Omega_{o''o'} \right] B_{o';p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}) = \sum_{o'} T_{oo'} A_{o';p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'})$$

$$\sum_{e'} \left[\delta_{ee'} - \sum_{e''} T_{ee''} \Omega_{e''e'} \right] B_{e';p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) = \sum_{e'} T_{ee'} A_{e';p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) , \quad (2.90)$$

όπου ο δείκτης ο(e) αριθμεί τα στοιχεία πίνακα που αντιστοιχούν σε $P + \ell + m$: περιττό (άρτιο) ακέραιο υπό την έννοια που αναφέρθηκε παραπάνω. Η διάσταση καθενός από τα επιμέρους συστήματα είναι $l_{\max}(\ell_{\max} + 2)$.

Το σκεδαζόμενο κύμα, που δίνεται στην Εξ. (2.78) σε μορφή αναπτύγματος σε διανυσματικά σφαιρικά κύματα ως προς τα κέντρα των σκεδαστών, μπορεί με τη βοήθεια της

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) h_{\ell}^+(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}) \quad (2.91)$$

(βλ. Παράρτημα Ζ') να γραφεί ως άθροισμα επίπεδων κυμάτων με ίδια ω και \mathbf{k}_{\parallel} ,

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}^s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_{\text{sc}}^s]_{\mathbf{g}\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) , \quad (2.92)$$

όπου $s = +(-)$ για $z > 0$ ($z < 0$). Σημειώνουμε ότι τα $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ στην Εξ. (2.92) 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. (2.92) εκφράζει το σκεδαζόμενο κύμα ως επαλληλία ενός πλήθους από περιθλώμενες δέσμες ($\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$) από τις οποίες μόνο εκείνες που αντιστοιχούν σε πραγματικό $K_{\mathbf{g}z}^s$ περιγράφουν οδεύοντα κύματα. Οι συντελεστές στην παραπάνω εξίσωση δίνονται από τις

$$[E_{\text{sc}}^s]_{\mathbf{g}\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{L}} \Delta_{\mathbf{L};\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) b_{\mathbf{L}}^+ , \quad (2.93)$$

όπου

$$\begin{aligned} \Delta_{E\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+ \psi_{\ell}} \left\{ i \left[\alpha_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - \alpha_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right. \\ &\quad - \left[\alpha_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right. \\ &\quad \left. \left. + \alpha_{\ell}^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right\} \\ &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \times \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) , \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{H\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+ \psi_{\ell}} \left\{ \left[\alpha_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \alpha_{\ell}^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right. \\ &\quad \left. + i \left[\alpha_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - \alpha_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right\} \\ &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) , \end{aligned} \quad (2.95)$$

με τα θ και ϕ να δηλώνουν κατά τα συνήθη τις γωνιακές μεταβλητές του \mathbf{K}_g^s , ενώ $A_0 = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ είναι η επιφάνεια της θεμελιώδους κυψελίδας του πλέγματος που περιγράφεται από την Εξ. (2.71). Στα \mathbf{K}_g^\pm το $+$ ($-$) ισχύει για $z > 0$ ($z < 0$), και το K_{gz}^\pm μπορεί να είναι πραγματικό ή φανταστικό. Στη δεύτερη περίπτωση το $\cos\theta$ στις συνήθεις εκφράσεις για τις $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_g^\pm)$ αντικαθίσταται από το K_{gz}^\pm/q . Εδώ πρέπει να τονίσουμε ότι, με βάση τις Εξ. (2.88) και (2.93), τα πλάτη $[E_{sc}]_{gp}^s$ εξαρτώνται από το προσπίπτον επίπεδο κύμα μέσω των συντελεστών $B_{L;p'}^+(\mathbf{K}_{g'}^{s'})$. Αυτοί υπολογίζονται από την Εξ. (2.89), με τα $A_{L;p'}^0(\mathbf{K}_{g'}^{s'})$ να δίνονται από τις Εξ. (1.61) και (1.62). Θυμίζουμε ότι ο δείκτης $s' = +(-)$ περιγράφει ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών από αριστερά (δεξιά).

Ας υποθέσουμε ότι ένα επίπεδο κύμα της μορφής (2.75) προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών από τα αριστερά. Τότε το διερχόμενο κύμα (προσπίπτον $+$ σκεδαζόμενο), στα δεξιά του επιπέδου, γράφεται στη μορφή

$$\mathbf{E}_{tr}^+(\mathbf{r}) = \sum_{gp} [E_{tr}]_{gp}^+ \exp(i\mathbf{K}_g^+ \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_g^+), \quad z > 0, \quad (2.96)$$

με

$$[E_{tr}]_{gp}^+ = [E_{in}]_{g'p'}^+ \delta_{pp'} \delta_{gg'} + [E_{sc}]_{gp}^+ = S_{gp;g'p'}^{++} [E_{in}]_{g'p'}^+ \quad (2.97)$$

και το ανακλώμενο, στα αριστερά του επιπέδου, στη μορφή

$$\mathbf{E}_{rf}^-(\mathbf{r}) = \sum_{gp} [E_{rf}]_{gp}^- \exp(i\mathbf{K}_g^- \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_g^-), \quad z < 0, \quad (2.98)$$

με

$$[E_{rf}]_{gp}^- = [E_{sc}]_{gp}^- = S_{gp;g'p'}^{--} [E_{in}]_{g'p'}^+, \quad (2.99)$$

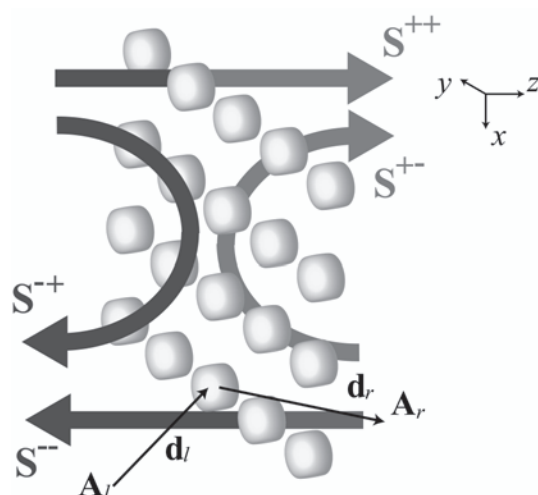
Οι σχέσεις (2.97) και (2.99) είναι στην ουσία σχέσεις ορισμού των στοιχείων πίνακα $S_{gp;g'p'}^{++}$, $S_{gp;g'p'}^{--}$ που περιγράφουν τη διέλευση και ανάκλαση, αντίστοιχα, για ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο από τα αριστερά. Υπολογίζονται από τις Εξ. (2.97) και (2.99) χρησιμοποιώντας την (2.93) και την (2.88) για $s' = +$. Παρόμοια ορίζουμε τα στοιχεία $S_{gp;g'p'}^{--}$ του πίνακα διέλευσης και τα στοιχεία $S_{gp;g'p'}^{+-}$ του πίνακα ανάκλασης για ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών από τα δεξιά [βάζουμε $s' = -$ στις Εξ. (2.75) και (2.88)]. Έτσι, έχουμε τελικά

$$S_{gp;g'p'}^{ss'} = \delta_{ss'} \delta_{pp'} \delta_{gg'} + \sum_L \Delta_{L;p}(\mathbf{K}_g^s) B_{L;p'}^+(\mathbf{K}_{g'}^{s'}). \quad (2.100)$$

Η φυσική διαδικασία που υποδηλώνουν οι πίνακες αυτοί παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχ. 2.3. Εύκολα μπορεί να αποδειχθεί η σχέση συμμετρίας

$$S_{gp;g'p'}^{-s-s'} = (-1)^{p+p'} S_{gp;g'p'}^{ss'}. \quad (2.101)$$

Όπως αναφέραμε, βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου LMS είναι ότι οι δομές που περιγράφει οικοδομούνται στρωματικά, κατά μήκος της διεύθυνσης z . Τα διάφορα στοιχεία που απαρτίζουν μια τέτοια δομή (πεπερασμένη ή άπειρη) μπορεί να είναι επίπεδα σκεδαστών σε



Σχήμα 2.3: Πίνακες διέλευσης και ανάκλασης για ένα επίπεδο σχεδαστών.

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 σχεδαστών 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. Έτσι, ένα κύμα στα αριστερά του επιπέδου θα γράφεται στη μορφή $\sum_{\mathbf{g}_p} E_{\mathbf{g}_p}^s \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_l]) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s)$ και ένα κύμα στα δεξιά του επιπέδου στη μορφή $\sum_{\mathbf{g}_p} E_{\mathbf{g}_p}^s \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_r]) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s)$.

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 \mathbf{S} . Συμβολίζοντας τους νέους αυτούς πίνακες με \mathbf{Q} παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 Q_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{\text{I}} &= S_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{++} \exp(i[\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l]) \\
 Q_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{\text{II}} &= S_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{+-} \exp(i[\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r - \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r]) \\
 Q_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{\text{III}} &= S_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{-+} \exp(-i[\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l]) \\
 Q_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{\text{IV}} &= S_{\mathbf{g}_p; \mathbf{g}'_p}^{--} \exp(-i[\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r]) .
 \end{aligned} \tag{2.102}$$

Η φυσική σημασία των παραπάνω πινάκων είναι η ίδια με αυτή των αντίστοιχων πινάκων \mathbf{S} , και από εδώ και στο εξής θα τους γράφουμε σε συμπαγή μορφή ως: \mathbf{Q}^{I} , \mathbf{Q}^{II} , \mathbf{Q}^{III} και \mathbf{Q}^{IV} . Αυτή η γραφή υπονοεί την ακόλουθη αλληλουχία στη δεικτοδότηση των στοιχείων των πινάκων αυτών: \mathbf{g}_11 , \mathbf{g}_12 , \mathbf{g}_21 , \mathbf{g}_22 , ... Ο δείκτης \mathbf{g} θεωρητικά εκτείνεται μέχρι το άπειρο, στην πράξη όμως κρατάμε g_{\max} το πλήθος διανύσματα του αντίστροφου πλέγματος (αυτά με το μικρότερο μέτρο) οπότε οι πίνακες \mathbf{Q} αποκτούν διαστάσεις $2g_{\max} \times 2g_{\max}$.

2.4 Ομοιογενές πλακίδιο

Σε ρεαλιστικές περιπτώσεις, οι διάφορες δομές αναπτύσσονται πάνω σε ένα υπόστρωμα, ενώ αρκετές φορές παρεμβάλλονται ομοιογενή υμένα. Είναι λοιπόν απαραίτητο η μέθοδος LMS 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 κυματόνισμα ενός επίπεδου κύματος στο μέσο j γράφεται στη μορφή $\mathbf{q}_j^\pm = \mathbf{q}_\parallel \pm [(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j - \mathbf{q}_\parallel^2]^{1/2} \hat{\mathbf{z}}$, με το $+$ ($-$) να υποδηλώνει ένα κύμα διαδιδόμενο προς τα δεξιά (αριστερά) κατά μήκος της διεύθυνσης z εάν $(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j > \mathbf{q}_\parallel^2$, και ένα κύμα που φθίνει στα δεξιά (αριστερά) εάν $(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j < \mathbf{q}_\parallel^2$. Αναπτύσσουμε τα κύματα αριστερά από το πλακίδιο ως προς το κέντρο $\mathbf{A}_1 = (0, 0, 0)$ στην αριστερή επιφάνεια και τα κύματα δεξιά από το πλακίδιο ως προς το 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

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^{s'} \exp(i\mathbf{q}_j^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j]) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}'}, \quad (2.103)$$

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

$$\mathbf{E}_{\text{tr}}(\mathbf{r}) = [E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^s \exp(i\mathbf{q}_j^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j]) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}, \quad (2.104)$$

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

$$\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{r}) = [E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^s \exp(i\mathbf{q}_j^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_0]) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}, \quad (2.105)$$

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 (βλ. Εδ. 1.2), οι οποίες, χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό της μεθόδου LMS, γράφονται

$$\begin{aligned} [E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^+ &= N_{\mathbf{p}}^{++} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^+ & [E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^- &= N_{\mathbf{p}}^{--} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^- \\ [E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^- &= N_{\mathbf{p}}^{-+} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^+ & [E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^+ &= N_{\mathbf{p}}^{+-} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^- , \end{aligned} \quad (2.106)$$

με

$$\begin{aligned} N_{\mathbf{p}}^{++} &= t_{23(\mathbf{p})} t_{12(\mathbf{p})} \exp(iq_{2z} h) [1 - \exp(iq_{2z} h) r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})}]^{-1} \\ N_{\mathbf{p}}^{+-} &= r_{32(\mathbf{p})} + t_{23(\mathbf{p})} r_{21(\mathbf{p})} t_{32(\mathbf{p})} \exp(iq_{2z} h) [1 - \exp(iq_{2z} h) r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})}]^{-1} \\ N_{\mathbf{p}}^{-+} &= r_{12(\mathbf{p})} + t_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} t_{12(\mathbf{p})} \exp(iq_{2z} h) [1 - \exp(iq_{2z} h) r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})}]^{-1} \\ N_{\mathbf{p}}^{--} &= t_{21(\mathbf{p})} t_{32(\mathbf{p})} \exp(iq_{2z} h) [1 - \exp(iq_{2z} h) r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})}]^{-1} , \end{aligned} \quad (2.107)$$

όπου $p = 1, 2$ για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα, και

$$\begin{aligned} t_{jj'(1)} &= \frac{2q_{jz}\sqrt{\varepsilon_{j'}\mu_{j'}}\sqrt{\frac{\varepsilon_j}{\mu_j}}}{\varepsilon_{j'}q_{jz} + \varepsilon_jq_{j'z}}, & t_{jj'(2)} &= \frac{2q_{jz}\mu_{j'}}{\mu_{j'}q_{jz} + \mu_jq_{j'z}} \\ r_{jj'(1)} &= \frac{\varepsilon_{j'}q_{jz} - \varepsilon_jq_{j'z}}{\varepsilon_{j'}q_{jz} + \varepsilon_jq_{j'z}}, & r_{jj'(2)} &= \frac{\mu_{j'}q_{jz} - \mu_jq_{j'z}}{\mu_{j'}q_{jz} + \mu_jq_{j'z}}. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Για την περιγραφή συνθετότερων δομών, στις οποίες το ομοιογενές πλακίδιο (ή η διαχωριστική επιφάνεια) συνδυάζονται με επίπεδο(α) σχεδιαστών 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. 2.3). Έτσι, τα στοιχεία των πινάκων διέλευσης και ανάκλασης ως προς αυτά τα σημεία γράφονται

$$\begin{aligned} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{++}\exp(i[\mathbf{K}_{3\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}_{1\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l]) \\ Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{+-}\exp(i[\mathbf{K}_{3\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}_{3\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r]) \\ Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{-+}\exp(-i[\mathbf{K}_{1\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}_{1\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l]) \\ Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{--}\exp(-i[\mathbf{K}_{1\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}_{3\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r]), \end{aligned} \quad (2.109)$$

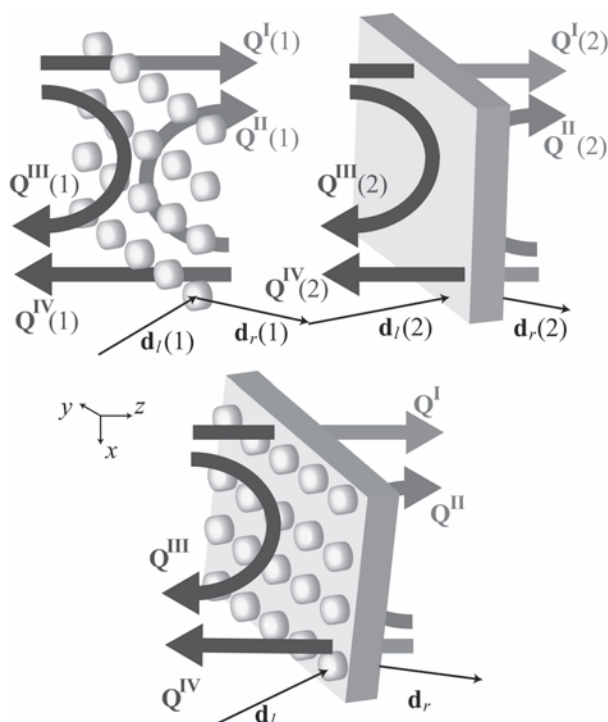
με $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^{\pm} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g} \pm [(\omega/c)^2\varepsilon_j\mu_j - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2]^{1/2}\hat{\mathbf{z}}$.

2.5 Σύνθετο πλακίδιο

Ένα σύνθετο πλακίδιο αποτελείται από πεπερασμένο πλήθος στοιχείων, όπου το κάθε στοιχείο μπορεί να είναι ένα επίπεδο από σχεδιαστές (Εδ. 2.3), ή μια επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια ή ομοιογενές πλακίδιο (Εδ. 2.4). Θυμίζουμε ότι αν δύο διαδοχικά επίπεδα βρίσκονται σε διαφορετικά περιβάλλοντα μέσα, που διαχωρίζονται με επίπεδη επιφάνεια, τότε αυτή θα πρέπει να θεωρηθεί ξεχωριστά σαν ένα επιπλέον στοιχείο που θα προκαλέσει σχεδιάσεις. Οι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης, \mathbf{Q} , για ένα ζευγάρι από διαδοχικά στοιχεία, έστω '1' και '2', υπολογίζονται συνδυάζοντας τους πίνακες $\mathbf{Q}(1)$ και $\mathbf{Q}(2)$ των δύο στοιχείων, όπως φαίνεται στο Σχ. 2.4. 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 σχεδιάσεις και αθροίζοντας άπειρες σειρές, ότι [81]

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{\text{I}} &= \mathbf{Q}^{\text{I}}(2) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{II}}(1)\mathbf{Q}^{\text{III}}(2)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{I}}(1) \\ \mathbf{Q}^{\text{II}} &= \mathbf{Q}^{\text{II}}(2) + \mathbf{Q}^{\text{I}}(2)\mathbf{Q}^{\text{II}}(1) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{III}}(2)\mathbf{Q}^{\text{II}}(1)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{IV}}(2) \\ \mathbf{Q}^{\text{III}} &= \mathbf{Q}^{\text{III}}(1) + \mathbf{Q}^{\text{IV}}(1)\mathbf{Q}^{\text{III}}(2) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{II}}(1)\mathbf{Q}^{\text{III}}(2)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{I}}(1) \\ \mathbf{Q}^{\text{IV}} &= \mathbf{Q}^{\text{IV}}(1) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{III}}(2)\mathbf{Q}^{\text{II}}(1)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{IV}}(2). \end{aligned} \quad (2.110)$$

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 αυτό τον τρόπο μπορούμε να βρούμε τους πίνακες σκέδασης ενός σύνθετου πλακιδίου που αποτελείται από οποιονδήποτε (πεπερασμένο) αριθμό στοιχείων.



Σχήμα 2.4: Υπολογισμός των πινάκων \mathbf{Q} ενός σύνθετου πλακιδίου από αυτούς των μεμονωμένων στοιχείων του.

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 τον γρήγορο και αποτελεσματικό υπολογισμό των πινάκων σκέδασης που χαρακτηρίζουν το συνολικό σύστημα. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε 2^M ($M = 0, 1, 2, \dots$) διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια. Έχοντας υπολογίσει τους πίνακες \mathbf{Q} του ενός μοναδιαίου πλακιδίου, οι αντίστοιχοι πίνακες για ένα ζευγάρι διαδοχικών τέτοιων πλακιδίων υπολογίζονται με τον τρόπο που περιγράφουν οι Εξ. (2.110). Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας ως μονάδες τους πίνακες \mathbf{Q} του ζευγαριού, υπολογίζονται οι πίνακες \mathbf{Q} για τέσσερα διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια, και έτσι, διπλασιάζοντας το πλήθος των μοναδιαίων πλακιδίων σε κάθε στάδιο, προκύπτουν τελικά οι πίνακες \mathbf{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.

Συνοψίζοντας, για ένα επίπεδο κύμα $[E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \exp(i\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}'}^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_L]) \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}'}^+)$, που προσπίπτει από τα αριστερά ενός (σύνθετου) πλακιδίου, βρίσκουμε το ανακλώμενο κύμα $\sum_{\mathbf{gp}} [E_{rf}]_{\mathbf{gp}}^- \exp(i\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}}^- \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_L]) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}}^-)$ στα αριστερά του πλακιδίου, και το διερχόμενο $\sum_{\mathbf{gp}} [E_{tr}]_{\mathbf{gp}}^+ \exp(i\mathbf{K}_{(R)\mathbf{g}}^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_R]) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{(R)\mathbf{g}}^+)$ 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}_L (\mathbf{A}_R) είναι το κατάλληλο σημείο αναφοράς στα αριστερά (δεξιά) του πλακιδίου. Έχουμε

$$[E_{rf}]_{\mathbf{gp}}^- = Q_{\mathbf{gp};\mathbf{g}'p'}^{\text{III}} [E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \quad (2.111)$$

$$[E_{tr}]_{\mathbf{gp}}^+ = Q_{\mathbf{gp};\mathbf{g}'p'}^{\text{I}} [E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ , \quad (2.112)$$

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

Έχοντας υπολογίσει το διερχόμενο κύμα, Εξ. (2.112), και το ανακλώμενο κύμα, Εξ. (2.112), για το δεδομένο προσπίπτον κύμα, μπορούμε να βρούμε τους συντελεστές διέλευσης, \mathcal{T} , και ανάκλασης, \mathcal{R} , για το (πεπερασμένο) πλακίδιο του κρυστάλλου. Ο συντελεστής \mathcal{T} (\mathcal{R}) ορίζεται ως το πηλίκο της ροής του διερχόμενου (ανακλώμενου) κύματος προς τη ροή του προσπίπτοντος κύματος. Ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting πάνω σε όλο το επίπεδο $x - y$ (στην πράξη αρκεί η ολοκλήρωση να γίνει στην επιφάνεια της μοναδιαίας κυψελίδας) στην κατάλληλη κάθε φορά πλευρά του πλακιδίου, και λαμβάνοντας τη χρονική μέση τιμή για μια περίοδο $T = 2\pi/\omega$, έχουμε

$$\mathcal{T} = \frac{\sum_{\mathbf{gp}} [E_{tr}]_{\mathbf{gp}}^+ \left([E_{tr}]_{\mathbf{gp}}^+ \right)^* K_{(R)\mathbf{g}z}^+ \frac{\mu_L}{\mu_R}}{[E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \left([E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \right)^* K_{(L)\mathbf{g}'z}^+} \quad (2.113)$$

$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{\mathbf{gp}} [E_{rf}]_{\mathbf{gp}}^- \left([E_{rf}]_{\mathbf{gp}}^- \right)^* K_{(L)\mathbf{g}z}^+}{[E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \left([E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^+ \right)^* K_{(L)\mathbf{g}'z}^+} , \quad (2.114)$$

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

$$\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R} . \quad (2.115)$$

Τέλος, ο συντελεστής απόσβεσης του πλακιδίου ορίζεται ως ο αρνητικός φυσικός λογάριθμος του συντελεστή διέλευσης, $-\ln \mathcal{T}$.

Ο πίνακας \mathbf{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

$$\begin{aligned}
S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{++} &= \exp(-i[\mathbf{K}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R}} - \mathbf{K}_{(\mathbf{L})\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{L}}]) Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} \\
S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{+-} &= \exp(-i[\mathbf{K}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R}} - \mathbf{K}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R}}]) Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} \\
S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{-+} &= \exp(-i[\mathbf{K}_{(\mathbf{L})\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{L}} - \mathbf{K}_{(\mathbf{L})\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{L}}]) Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} \\
S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{--} &= \exp(-i[\mathbf{K}_{(\mathbf{L})\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{L}} - \mathbf{K}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R}}]) Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} ,
\end{aligned} \tag{2.116}$$

για δεδομένα ω και \mathbf{k}_{\parallel} . Οι φασικοί παράγοντες στις Εξ. (2.116) προέρχονται από το γεγονός ότι όλα τα κύματα πρέπει να αναφέρονται στην ίδια κοινή αρχή συντεταγμένων. Η διατήρηση της ροής υπαγορεύει ο \mathbf{S} να είναι μοναδιακός, ενώ η αρχή της αιτιότητας επιβάλλει οι ιδιοτιμές του \mathbf{S} να είναι αναλυτικές συναρτήσεις στο άνω μιγαδικό ημιεπίπεδο των συχνοτήτων [121]. 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 αντιστροφος 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

$$\det [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{II}}(\text{L})\mathbf{Q}^{\text{III}}(\text{R})] = 0 . \tag{2.117}$$

2.6 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου

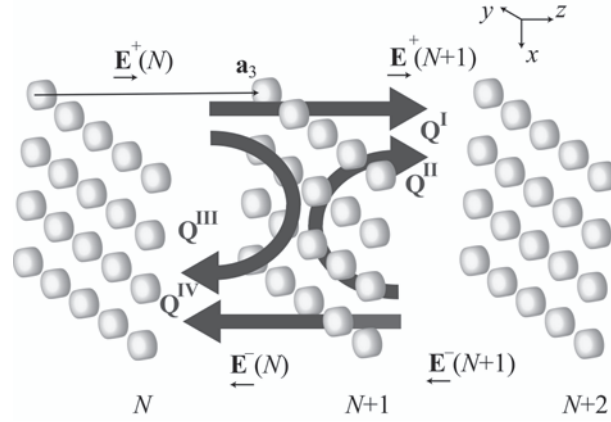
Ένας άπειρος 3Δ κρυστάλλος οικοδομείται ως αλληλουχία πανομοιότυπων μοναδιαίων πλακιδίων, παράλληλων στο επίπεδο $x - y$, που εκτείνονται σε όλο τον χώρο (από $z \rightarrow -\infty$ έως $z \rightarrow +\infty$) (Σχ. 2.5). Αν η Εξ. (2.71) περιγράφει το 2Δ πλέγμα του μοναδιαίου πλακιδίου, και το \mathbf{a}_3 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}_{\parallel} , έχει τη μορφή

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} \{ E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+(N) \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_r(N)]) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+) \\
&\quad + E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^-(N) \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_r(N)]) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^-) \} .
\end{aligned} \tag{2.118}$$

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

$$\begin{aligned}
E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^-(N) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N + 1) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) \\
E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+(N + 1) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N + 1) ,
\end{aligned} \tag{2.119}$$

Σχήμα 2.5: Οι πίνακες \mathbf{Q} για μια (ημι)άπειρη περιοδική φωτονική δομή

όπου \mathbf{Q} είναι οι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης του μοναδιαίου πλακιδίου.

Ένα γενικευμένο κύμα Bloch ορίζεται από την ιδιότητα

$$E_{\text{gp}}^s(N+1) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3) E_{\text{gp}}^s(N), \quad (2.120)$$

όπου

$$\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z(\omega; \mathbf{k}_{\parallel})). \quad (2.121)$$

Με δεδομένο το \mathbf{k}_{\parallel} , το k_z είναι μια εν γένει μιγαδική συνάρτηση του ω , που προσδιορίζεται ως εξής: Αντικαθιστώντας την Εξ. (2.120) στο αριστερό μέλος των (2.119) παίρνουμε

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\text{I}} & \mathbf{Q}^{\text{II}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\text{III}} & \mathbf{Q}^{\text{IV}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix}, \quad (2.122)$$

και εφόσον

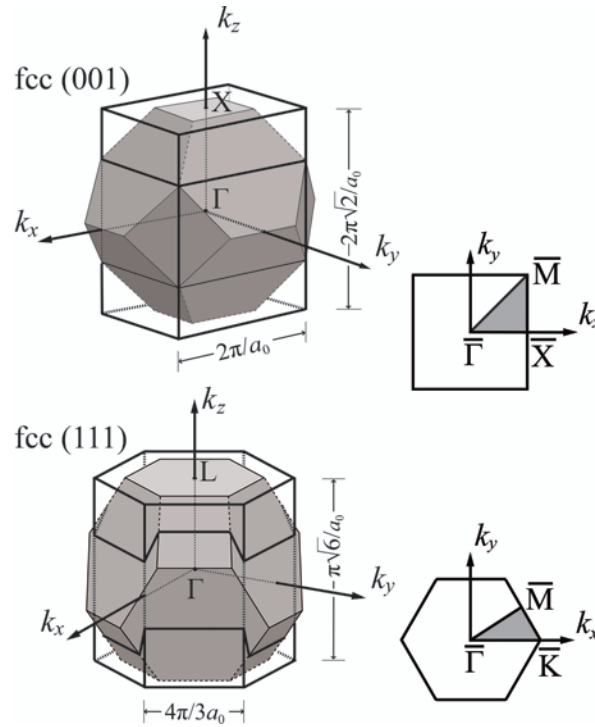
$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\text{III}} & \mathbf{Q}^{\text{IV}} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -[\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1}\mathbf{Q}^{\text{III}} & [\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.123)$$

προκύπτει

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\text{I}} & \mathbf{Q}^{\text{II}} \\ -[\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1}\mathbf{Q}^{\text{III}}\mathbf{Q}^{\text{I}} & [\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1}[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{III}}\mathbf{Q}^{\text{II}}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix} \\ & = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.124)$$

η οποία συνιστά ένα πρόβλημα ιδιοτιμών. Στην Εξ. (2.124), ο πρώτος όρος αποτελεί τον πίνακα σκέδασης, \mathbf{S} , του άπειρου κρυστάλλου. Η αντίστοιχη εξίσωση για τη σκέδαση ηλεκτρονίων από ατομικά επίπεδα διατυπώθηκε από τον McRae [122, 123]. Τα \mathbf{E}^{\pm} είναι πίνακες-στήλες με πλήθος στοιχείων $2g_{\text{max}}$. 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 \mathbf{Q}

(Εδ. 2.3). 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 \mathbf{S} , 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.



Σχήμα 2.6: Οι ανηγμένες ζώνες στον χώρο των \mathbf{k} που αντιστοιχούν στα κρυσταλλογραφικά επίπεδα (001) και (111) του πλέγματος fcc (αριστερά) και οι αντίστοιχες EZB (δεξιά). Για λόγους σύγκρισης παρουσιάζεται και η συμβατική ZB του fcc (σκιασμένες περιοχές αριστερά). Οι σκιασμένες περιοχές δεξιά είναι τα μη αναγωγίσιμα τμήματα των αντίστοιχων EZB.

Σ' αυτό το σημείο αξίζει να σημειώσουμε ότι η δομή ζωνών εμφανίζει περιοδικότητα παράλληλα στο επίπεδο $x - y$, όπως προκύπτει από την Εξ. (2.119). Πράγματι, η 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. (2.124) 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, με συνέπεια να έχουμε περιοδικότητα στη δομή των ζωνών κάθετα στο επίπεδο $x - y$. Μπορούμε κατά συνέπεια να επιλέξουμε την ανηγμένη ζώνη του \mathbf{k} στον αντίστροφο χώρο ως εξής: $(\mathbf{k}_{\parallel}, \text{Re}k_z)$ με το $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ να εκτείνεται σε όλη την EZB του δεδομένου κρυσταλλογραφικού επιπέδου, και με $-\|\mathbf{b}_3\|/2 < \text{Re}k_z \leq \|\mathbf{b}_3\|/2$, όπου $\mathbf{b}_3 \equiv 2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)/[\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)] = 2\pi/a_{3z} \hat{\mathbf{z}}$, ενώ $|\mathbf{a}_1| \equiv a_0$ (βλ. Σχ. 2.6). Εδώ αξίζει να σημειωθεί ότι όταν υπάρχει επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας που σχετίζεται με την υπό

μελέτη κρυσταλλογραφική επιφάνεια, οι λύσεις (κύματα Bloch) της Εξ. (2.124) 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. (2.124) δίνουν πραγματικό $k_z(\omega; \mathbf{k}_{\parallel})$ και οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε αυτές είναι διαδιδόμενες καταστάσεις Bloch στον συγκεκριμένο άπειρο κρύσταλλο. Οι υπόλοιπες ιδιοτιμές της (2.124) δίνουν μιγαδικό $k_z(\omega; \mathbf{k}_{\parallel})$ και τα κύματα που αντιστοιχούν σε αυτές είναι φθίνοντα, με 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 $z \rightarrow \infty$) 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_1 . Με άλλα λόγια, το πλάτος του κύματος είναι ανάλογο του $\exp(-q_1 D)$.

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 EZB· στο υπόλοιπο μέρος της EZB 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 ZB (βλ. Σχ. 2.6). 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}_{\parallel} είναι το μέγεθος που διατηρείται. Μια περιοχή συχνοτήτων στην οποία δεν υπάρχουν διαδιδόμενα κύματα για το δεδομένο \mathbf{k}_{\parallel} συνιστά ένα *χάσμα συχνοτήτων* για αυτό το \mathbf{k}_{\parallel} . Εάν σε μια περιοχή συχνοτήτων δεν υπάρχουν διαδιδόμενα κύματα για κάθε τιμή του \mathbf{k}_{\parallel} , τότε η περιοχή αυτή χαρακτηρίζεται ως *απόλυτο χάσμα συχνοτήτων*.

2.7 Ημιάπειρος κρύσταλλος

Στο προηγούμενο εδάφιο αξιοποιήσαμε τον πίνακα σκέδασης, \mathbf{S} , ο οποίος συνδέει το σχεδάζόμενο με το προσπίπτον κύμα σε έναν άπειρο κρύσταλλο και ορίζεται μέσω των Εξ. (2.119). Οι σχέσεις αυτές μπορούν να ξαναγραφούν στη μορφή

$$\begin{aligned}
 E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+(N+1) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} \mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} E_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} \mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} \left\{ [\mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}}]^{-1} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N) - [\mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}}]^{-1} \mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) \right\} \\
 E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^-(N+1) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} [\mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}}]^{-1} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N) - [\mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}}]^{-1} \mathbf{Q}_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N),
 \end{aligned}
 \tag{2.125}$$

από την οποία προκύπτει ο πίνακας μεταφοράς, \mathbf{M} , που συνδέει τα πεδία στα αριστερά και τα δεξιά ενός επιπέδου του κρυστάλλου [40]

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N+1) \\ \mathbf{E}^-(N+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^I - \mathbf{Q}^{II} [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \mathbf{Q}^{III} & \mathbf{Q}^{II} [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \\ - [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \mathbf{Q}^{III} & [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N) \end{pmatrix}. \quad (2.126)$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Bloch, Εξ. (2.120), οδηγούμαστε σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμών για τον πίνακα \mathbf{M} , αντίστοιχο με αυτό της Εξ. (2.124)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^I - \mathbf{Q}^{II} [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \mathbf{Q}^{III} & \mathbf{Q}^{II} [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \\ - [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \mathbf{Q}^{III} & [\mathbf{Q}^{IV}]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N) \end{pmatrix} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N) \end{pmatrix}. \quad (2.127)$$

Ο πίνακας ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου, για δεδομένα ω και \mathbf{k}_{\parallel} , μπορεί να υπολογιστεί από τα ιδιοδιανύσματα, \mathbf{f} , του πίνακα \mathbf{M} , ως εξής: Οι ιδιοκαταστάσεις Bloch κατατάσσονται αρχικά ανάλογα με το αν διαδίδονται (ή φθίνουν) κατά τη θετική ή αρνητική διεύθυνση του άξονα z . Αυτή η κατάταξη γίνεται άμεσα για τα φθίνοντα κύματα, σύμφωνα με το πρόσημο του $\text{Im}k_z$. Για τα διαδιδόμενα κύματα ($\text{Im}k_z = 0$) εξετάζεται η διεύθυνση της ροής ενέργειας, η οποία προσδιορίζεται από την ποσότητα [124]

$$\mathcal{E}_V = \sum_{\substack{\mathbf{gP} \\ (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 < q^2}} (|f_{\mathbf{gP}}^+|^2 - |f_{\mathbf{gP}}^-|^2) - 2\text{Im} \sum_{\substack{\mathbf{gP} \\ (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 > q^2}} f_{\mathbf{gP}}^+ [f_{\mathbf{gP}}^-]^*, \quad (2.128)$$

όπου $f_{\mathbf{gP}}^s$ είναι τα στοιχεία του εκάστοτε ιδιοδιανύσματος. Όπως αναφέραμε στα προηγούμενα εδάφια, στην πράξη κρατάμε έναν πεπερασμένο αριθμό, g_{\max} , διανυσμάτων του αντίστροφου πλέγματος (αυτά με το μικρότερο μέγεθος), οπότε παίρνουμε $4g_{\max}$ ιδιοτιμές και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Τα μισά αντιστοιχούν σε καταστάσεις διαδιδόμενες κατά τη θετική διεύθυνση ($z > 0$) και τα άλλα μισά σε καταστάσεις διαδιδόμενες κατά την αρνητική διεύθυνση ($z < 0$), ως αποτέλεσμα της συμμετρίας χρονικής αντιστροφής. 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 θετικά διαδιδόμενες καταστάσεις (+) και οι επόμενες $2g_{\max}$ στήλες περιέχουν τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε αρνητικά διαδιδόμενες καταστάσεις (-). Ο πίνακας αυτός έχει μια απλή φυσική σημασία: Προβάλλει τον χώρο των θετικά και αρνητικά διαδιδόμενων ιδιοκαταστάσεων Bloch, \mathbf{V}^+ και \mathbf{V}^- , αντίστοιχα, στην αρχική βάση επιπέδων κυμάτων, δηλαδή

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(0) \\ \mathbf{E}^-(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^{++} & \mathbf{F}^{+-} \\ \mathbf{F}^{-+} & \mathbf{F}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}^+ \\ \mathbf{V}^- \end{pmatrix}. \quad (2.129)$$

Εξ ορισμού, κάθε ιδιοκατάσταση διαδίδεται στον κρύσταλλο χωρίς να αλλάζει κατάσταση και, από την άλλη, για έναν ημιάπειρο κρύσταλλο δεν υπάρχει πίσω επιφάνεια για να ανακλάσει τις θετικά διαδιδόμενες 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 $\mathbf{V}^- = \mathbf{0}$ [125]. Αυτή η συνθήκη, όταν εφαρμοστεί στην Εξ. (2.129), οδηγεί στην

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^+(0) &= \mathbf{F}^{++}\mathbf{V}^+ \\ \mathbf{E}^-(0) &= \mathbf{F}^{-+}\mathbf{V}^+, \end{aligned} \quad (2.130)$$

και κατά συνέπεια,

$$\mathbf{E}^-(0) = \mathbf{F}^{-+} [\mathbf{F}^{++}]^{-1} \mathbf{E}^+(0) \equiv \mathbf{R}_\infty \mathbf{E}^+(0), \quad (2.131)$$

που ορίζει τον πίνακα ανάκλασης, \mathbf{R}_∞ , ενός ημιάπειρου φωτονικού κρυστάλλου. Ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου, \mathcal{R}_∞ , υπολογίζεται μέσω του πίνακα \mathbf{R}_∞ κατ' αναλογία με την Εξ. (2.114).

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 (2.130) 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. (2.130) γίνεται [99]

$$\mathbf{F}^{++}\mathbf{V}^+ = \mathbf{E}^+(0) = \mathbf{0}, \quad (2.132)$$

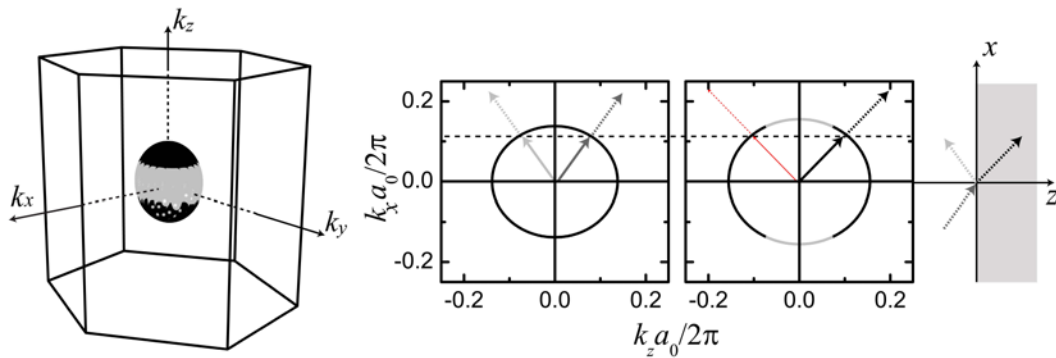
που ικανοποιείται όταν

$$\det [\mathbf{F}^{++}] = 0. \quad (2.133)$$

2.8 Επιφάνειες σταθερής συχνότητας

Μια ενδιαφέρουσα περιγραφή των οπτικών ιδιοτήτων ενός φωτονικού κρυστάλλου, η οποία παρέχει τις τιμές του κυματανύσματος σε κάθε δυνατή διεύθυνση στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} σε μια συγκεκριμένη συχνότητα και, όπως περιγράψαμε στο Εδ. 1.2, προσφέρει πληροφορίες για τη διαθλαστική συμπεριφορά του κρυστάλλου, δίνεται από τις επιφάνειες σταθερής συχνότητας, $\omega(\mathbf{k}) = \text{σταθ.}$. Οι επιφάνειες αυτές είναι ανάλογες με τις γνωστές από τη Φυσική Στερεάς Κατάστασης επιφάνειες Fermi [126]. Στο Σχ. 2.7 παρουσιάζουμε μια τέτοια επιφάνεια σταθερής συχνότητας για έναν φωτονικό κρυστάλλο πλέγματος fcc από μεταλλικούς νανοφλοιούς, τον οποίο βλέπουμε ως επαλληλία επιπέδων (111), στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} που σχετίζεται με το επίπεδο (111) (βλ. Σχ. 2.6), για μια χαμηλή συχνότητα όπου ο κρυστάλλος μπορεί σε καλή προσέγγιση να θεωρηθεί ως ομοιογενές και ισότροπο μέσο. Η επιφάνεια είναι σχεδόν σφαιρική, όπως αναμένεται για ένα τέτοιο μέσο· σε ένα ομοιογενές και ισότροπο μέσο οι επιφάνειες σταθερής συχνότητας είναι σφαιρικές, με ακτίνα που αυξάνεται όσο αυξάνεται η συχνότητα, όπως προκύπτει από τη σχέση διασποράς $\omega = cq/\sqrt{\epsilon\mu}$.

Η διαθλαστική συμπεριφορά του κρυστάλλου μπορεί να συναχθεί από τις επιφάνειες σταθερής συχνότητας με την ακόλουθη διαδικασία. Καταρχάς, λόγω της συμμετρίας της επιφάνειας ως προς τον άξονα z , μπορούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, να περιορίσουμε την ανάλυση σε μια προβολή της επιφάνειας σε κάποιο επίπεδο του χώρου \mathbf{k} , έστω $k_x - k_z$, και να μελετήσουμε την πρόσπτωση στην $x - y$ επιφάνεια του κρυστάλλου. Στο δεξιό μέρος του Σχ. 2.7 παρουσιάζεται η προβολή της επιφάνειας σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου στο επίπεδο



Σχήμα 2.7: Αριστερά: Επιφάνεια σταθερής συχνότητας φωτονικού κρυστάλλου fcc από μεταλλικούς νανοφλοιούς στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} που αντιστοιχεί στο κρυσταλλογραφικό επίπεδο (111) του πλέγματος fcc (βλ. Σχ. 2.6), για μια συχνότητα στην οποία ο κρύσταλλος μπορεί να θεωρηθεί σε καλή προσέγγιση ως ομοιογενές και ισότροπο μέσο. Δεξιά: Διαγράμματα κυματανυσμάτων στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τον ίδιο κρύσταλλο. Στο αριστερό διάγραμμα παρουσιάζεται η καμπύλη σταθερής συχνότητας στον αέρα και στο δεξιό η αντίστοιχη καμπύλη στον κρύσταλλο. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή παρέχει τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Τα συνεχή βέλη παριστούν το προσπίπτον (σκούρο γκρι), ανακλώμενο (ανοιχτό γκρι) και διαθλώμενο (μαύρο) κυματόνυμα στα διάφορα μέσα. Με διακεκομμένα βέλη κάθετα στις καμπύλες σταθερής συχνότητας δείχνουμε τις αντίστοιχες ταχύτητες ομάδες. Τα λεπτά κόκκινα βέλη αντιστοιχούν σε κυματόνυμα και ταχύτητες ομάδες διαθλώμενου κύματος για τα οποία η συνιστώσα k_x διατηρείται αλλά παραβιάζεται η αιτιότητα. Στο περιθώριο παρουσιάζεται η εικόνα ανάκλασης και διάθλασης στον πραγματικό χώρο.

$k_x - k_z$, μαζί με την αντίστοιχη καμπύλη σταθερής συχνότητας του περιβάλλοντος μέσου, έστω του αέρα. Προφανώς η καμπύλη σταθερής συχνότητας του αέρα είναι κύκλος μοναδιαίας ακτίνας. Στο δεξιό μέρος του Σχ. 2.7, με μαύρο χρώμα συμβολίζονται τα τμήματα εκείνα της καμπύλης σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου που αντιστοιχούν σε κύματα διαδιδόμενα και στον αέρα, ενώ με γκρι χρώμα συμβολίζονται τα τμήματα της καμπύλης που αντιπροσωπεύουν κύματα φθίνοντα στον αέρα. Όταν ένα κύμα προσπίπτει από τον αέρα στην επιφάνεια $x - y$ του κρυστάλλου, η παράλληλη στην επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος (k_x , έχοντας θεωρήσει $k_y = 0$), διατηρείται. Η συνθήκη αυτή παρέχεται στο Σχ. 2.7 από την οριζόντια διακεκομμένη γραμμή. Οι τομές αυτής της γραμμής με την καμπύλη σταθερής συχνότητας του αέρα προσδιορίζουν το κυματόνυμα του προσπίπτοντος ($k_z > 0$) και ανακλώμενου ($k_z < 0$) κύματος. Αντίστοιχα, οι τομές της παράλληλης γραμμής με την επιφάνεια σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου παρέχουν δύο πιθανές επιλογές για τη διαθλώμενη ακτίνα. Για να καθοριστεί ποιά από τις δύο είναι η πραγματική διαθλώμενη ακτίνα, πρέπει να υπολογιστεί η διεύθυνση της ταχύτητας ομάδας, $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})$. Η ταχύτητα ομάδας καθορίζει τη ροή ενέργειας του κύματος: δεν είναι απαραίτητα παράλληλη με το κυματόνυμα, είναι όμως εξ ορισμού κάθετη στην επιφάνεια σταθερής συχνότητας και δείχνει προς τη φορά αύξησης της συχνότητας. Επιπλέον, η ροή ενέργειας της διαθλώμενης ακτίνας θα πρέπει να απομακρύνεται

από τη διεπιφάνεια, προς το εσωτερικό του κρυστάλλου (αρχή της αιτιότητας) [87,89,90]. Με τον τρόπο αυτό καταλήγουμε ότι, στο Σχ. 2.7, το κυματόνισμα της διαθλώμενης ακτίνας είναι αυτό που έχει θετική k_z (και φυσικά θετική k_x) συνιστώσα και συμβολίζεται με χοντρή μαύρη γραμμή. Στο περιθώριο του Σχ. 2.7 δείχνουμε και την αντίστοιχη εικόνα στον πραγματικό χώρο, όπου πράγματι φαίνεται μια θετικά διαθλώμενη ακτίνα, με γωνία διάθλασης λίγο μικρότερη από τη γωνία πρόσπτωσης, όπως αναμένεται για ένα μέσο που μπορεί σε καλή προσέγγιση να θεωρηθεί ομοιογενές και ισότροπο, με δείκτη διάθλασης λίγο μεγαλύτερο της μονάδας.

Κεφάλαιο 3

Ομοιογενοποίηση περιοδικών φωτονικών δομών

Όπως αναφέραμε στην εισαγωγή, θεμελιώδες πρόβλημα στη μελέτη των μεταϊλικών αποτελεί η ομοιογενοποίηση μιας περιοδικής δομής, η δυνατότητα περιγραφής της δηλαδή ως ισοδύναμο ομοιογενές μέσο. Η ΗΜ απόκριση φωτονικών κρυστάλλων και οπτικών μεταϊλικών μπορεί να περιγραφεί, εν γένει, μέσω τανυστών διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας που εξαρτώνται από τη συχνότητα, ω , και το κυματόνισμα, \mathbf{q} [127]. Μια τυπική φωτονική δομή αποτελείται συνήθως από μια περιοδική διάταξη σχεδιαστών σε ένα ομοιογενές περιβάλλον μέσο [72, 73]. Αν το μήκος κύματος του ΗΜ πεδίου είναι πολύ μεγαλύτερο από τις διαστάσεις των σχεδιαστών και τις αποστάσεις μεταξύ τους, είναι δυνατό να μπορεί να εφαρμοστεί μια προσέγγιση τοπικού ισοδύναμου μέσου, με ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους που μπορεί να εξαρτώνται από τη συχνότητα, αλλά είναι ανεξάρτητες από το κυματόνισμα. Σε έναν κρύσταλλο κυβικής συμμετρίας οι τρεις κύριοι άξονες είναι φυσικά ισοδύναμοι. Κατά συνέπεια περιμένει κανείς ο κρύσταλλος να είναι ιστροπικός (στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος), και η οπτική του απόκριση να περιγράφεται από βαθμωτή διηλεκτρική συνάρτηση και μαγνητική διαπερατότητα, $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$ και $\mu_{\text{eff}}(\omega)$, αντίστοιχα. Τα πράγματα είναι προφανώς διαφορετικά για κρυστάλλους χαμηλότερης συμμετρίας, όπου τανυστικές, και όχι βαθμωτές ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι είναι απαραίτητες. Τα τελευταία χρόνια, το πρόβλημα της ομοιογενοποίησης ανιστροπικών κρυστάλλων έχει αναδειχθεί ως βασικό ερευνητικό αντικείμενο, μια και πολλά από τα προτεινόμενα μεταϊλικά είναι ανιστροπικά [87–89, 128–134].

Χάρη στην απλότητά τους, ημιστατικές θεωρίες ισοδύναμου μέσου όπως οι θεωρίες Maxwell - Garnett [42] και Bruggeman [43], καθώς και επεκτάσεις αυτών για υψηλότερες συχνότητες [135], χρησιμοποιούνται ευρέως για την ομοιογενοποίηση φωτονικών δομών. Ωστόσο, παρότι τέτοιες προσεγγίσεις είναι αρκετά ακριβείς για κάποιες περιπτώσεις, συχνά αποτυγχάνουν τελείως, ή δεν μπορούν καν να εφαρμοστούν. Σχέσεις κλειστού τύπου για την ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση φωτονικών κρυστάλλων στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος έχουν εξαχθεί στα πλαίσια του υπολογισμού φωτονικής δομής ζωνών με τη μέθοδο επιπέδων κυμάτων [35–37]. Η προσέγγιση αυτή μπορεί να χειριστεί δομές με μοναδιαία κυψελίδα τυχαίας γεωμετρίας και κατά συνέπεια να περιγράψει οπτική ανιστροπία. Ωστόσο, υποφέρει από τα συνήθη μειονεκτήματα των μεθόδων επιπέδων κυμάτων, όπως η αργή σύγκλιση στην περίπτωση δομών με σχετικά υψηλή αντίθεση διηλεκτρικών συναρτήσεων, ενώ η επέκτασή της πέρα από το ημιστατικό όριο δεν είναι εύκολη. Η οπτική απόκριση ενός τυχαίου περιοδικού πλέγματος σχεδιαστών, στη διπολική προσέγγιση, μπορεί να περιγραφεί από τανυστές ισοδύναμης διπολικής πολωσιμότητας που εξαρτώνται από τη συχνότητα και το κυματόνισμα [136],

οι οποίοι, στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος (ημιστατικό όριο), οδηγούν σε κατάλληλες γενικεύσεις της εξίσωσης Clausius - Mossotti [136, 137]. Ο υπολογισμός τοπικών ισοδύναμων HM παραμέτρων για πλέγματα ηλεκτρικών και μαγνητικών διπόλων έχει συζητηθεί και από τους Simovski και Tretyakov [138]. Άλλες μέθοδοι που έχουν προταθεί είναι η ομοιογενοποίηση δύο βημάτων, όπου κάθε συστατικό της σύνθετης δομής εξομοιώνεται με ισοδύναμο μέσο πριν ληφθούν οι ισοδύναμες παράμετροι για τη συνολική δομή ως μέσος όρος των ομοιογενοποιημένων συστατικών [38], μια μη γραμμική μέθοδος που αξιοποιεί τον πίνακα μεταφοράς [139], μια μέθοδος που εξομοιώνει τα συστατικά της σύνθετης δομής με ηλεκτρικά ρεύματα [140], και μια μέθοδος που βασίζεται σε μαθηματική παρεμβολή στις συνιστώσες του HM πεδίου [141]. Από την άλλη, ο Silveirinha ανέπτυξε μια γενική, αυτοσυνεπή μέθοδο ομοιογενοποίησης, που μπορεί να περιγράψει τυχαία μη μαγνητικά μεταϋλικά μέσω μη τοπικών ισοδύναμων παραμέτρων [39, 142], ενώ πρόσφατα προτάθηκε και μια μέθοδος που υπολογίζει τανυστικές ισοδύναμες παραμέτρους, εν γένει εξαρτώμενες από το κυματόνισμα, από πρώτες αρχές [41]. Ωστόσο, προκειμένου να είναι πραγματικά χρήσιμη σε πρακτικές εφαρμογές, μια μέθοδος ομοιογενοποίησης θα πρέπει να παρέχει τανυστές ισοδύναμων HM παραμέτρων που δεν εξαρτώνται από την πόλωση και τη διεύθυνση διάδοσης του κύματος [138]. Περαιτέρω προσπάθειες σε αυτή την κατεύθυνση έχουν πραγματοποιηθεί τα τελευταία χρόνια [143–145]. Μια από τις δημοφιλέστερες μεθόδους ωστόσο, παρά τις αδυναμίες της, είναι η μέθοδος αντίστροφης σκέδασης, ή μέθοδος ομοιογενοποίησης μέσω του πίνακα σκέδασης \mathbf{S} [44–47], καθώς και βελτιώσεις ή γενικεύσεις της [146–149].

Θα ξεκινήσουμε το κεφάλαιο παρουσιάζοντας την απλή μέθοδο ομοιογενοποίησης Maxwell - Garnett στην περίπτωση ισοτροπικών και ανισοτροπικών συστημάτων. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τη μέθοδο ομοιογενοποίησης πεπερασμένου πλακιδίου μέσω αντίστροφης σκέδασης, σχολιάζοντας τις αδυναμίες της, εξηγώντας την προέλευση αφύσικων δομών συντονισμού στις ισοδύναμες HM παραμέτρους που προκύπτουν, και προτείνοντας τρόπους αντιμετώπισης των προβλημάτων αυτών. Τέλος, θα παρουσιάσουμε μια νέα μέθοδο ομοιογενοποίησης που μπορεί να περιγράψει εξίσου καλά ισοτροπικά και ανισοτροπικά μεταϋλικά, βασισμένη στη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του άπειρου κρυστάλλου και τον συντελεστή ανάκλασης στη διεπιφάνεια μεταξύ του ημιάπειρου κρυστάλλου και του ομοιογενούς περιβάλλοντος μέσου. Η μέθοδος αυτή έχει το πλεονέκτημα ότι εξετάζει την απόκριση του κρυστάλλου για πρόσπτωση υπό οποιαδήποτε γωνία, ενώ παρέχει ισχυρά εσωτερικά κριτήρια για τον έλεγχο της ακρίβειας των υπολογισμένων ισοδύναμων HM παραμέτρων [40].

Προκειμένου να παρουσιάσουμε τις μεθόδους ομοιογενοποίησης με συστηματικό τρόπο, είναι απαραίτητο να εξετάσουμε ένα συγκεκριμένο παράδειγμα. Θα θεωρήσουμε έναν άπειρο κρυστάλλο fcc από μεταλλικούς νανοφλοιούς, καθώς και πεπερασμένα πλακίδια αυτού. Η οπτική απόκριση των μεταλλικών νανοφλοιών θα εξεταστεί διεξοδικά στο επόμενο κεφάλαιο. Για τις ανάγκες του παρόντος κεφαλαίου είναι αρκετό να αναφέρουμε ότι πρόκειται για σύνθετα σφαιρικά μεταλλοδιηλεκτρικά σωματίδια, αποτελούμενα από έναν διηλεκτρικό πυρήνα, ακτίνας S_1 , που περιγράφεται από διηλεκτρική συνάρτηση ϵ_1 και μαγνητική διαπερατότητα μ_1 , καλυμμένο από έναν μεταλλικό φλοιό πάχους C (έτσι ώστε η συνολική ακτίνα του σύνθετου σωματιδίου να είναι $S = S_1 + C$) με διηλεκτρική συνάρτηση ϵ_2 και μαγνητική διαπερατότητα μ_2 , τα οποία εμφανίζουν 2^{ℓ} -πολικούς συντονισμούς ηλεκτρικού τύπου λόγω διέγερσης πλάσμονικών καταστάσεων στη μεταλλική επιφάνεια. Σε ό,τι ακολουθεί, θα θεωρούμε ότι το μεταλλικό υλικό περιγράφεται ικανοποιητικά από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude [126] (βλ.

και Παράρτημα Δ')

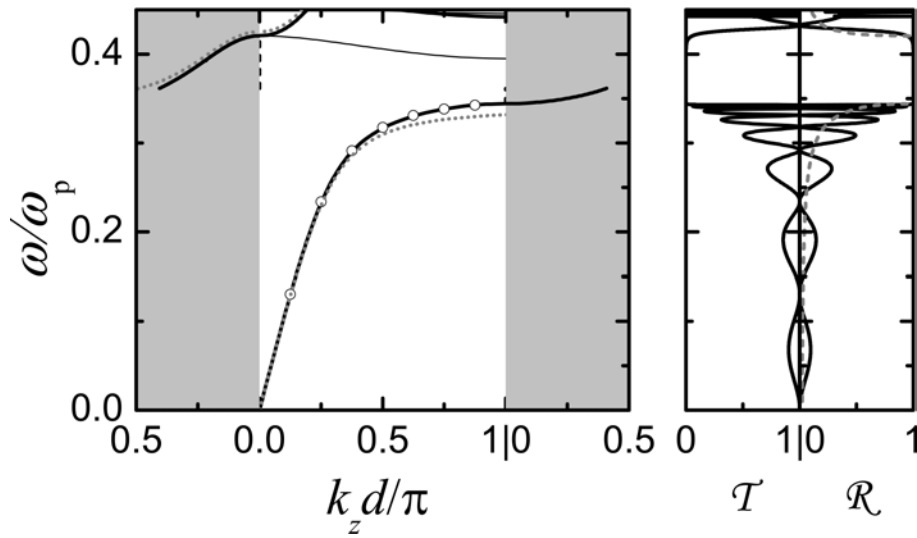
$$\varepsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\tau^{-1})}, \quad (3.1)$$

όπου ω_p είναι η συχνότητα πλάσματος του μετάλλου και τ ο χρόνος αποκατάστασης των ελεύθερων ηλεκτρονίων, ο οποίος περιγράφει την απορρόφηση στο μέταλλο, ενώ $\mu_2 = 1$. Όταν χρησιμοποιούμε τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude είναι βολικό να εκφράζουμε τη συχνότητα σε μονάδες ω_p και το μήκος σε μονάδες c/ω_p . Σημειώνουμε ότι, για μια τυπική τιμή $\hbar\omega_p \approx 10\text{eV}$, το c/ω_p αντιστοιχεί σε περίπου 20nm.

3.1 Φωτονική δομή ζωνών

Θα εξετάσουμε έναν φωτονικό κρύσταλλο πλέγματος fcc, το οποίο οικοδομούμε ως επαλληλία επιπέδων (001) από μεταλλικούς νανοφλοιούς. Οι μεταλλικοί νανοφλοιοί αποτελούνται από έναν πυρήνα διοξειδίου του πυριτίου (SiO_2) ($\varepsilon_1 = 2.13$ [150], $\mu_1 = 1$) ακτίνας $S_1 = 0.7c/\omega_p$ καλυμμένο από μεταλλικό φλοιό πάχους $C = 0.3c/\omega_p$, έτσι ώστε η συνολική ακτίνα των νανοφλοιών είναι $S = c/\omega_p$. Για τα επίπεδα (001) παίρνουμε απόσταση πλησιέστερων γειτόνων $a_0 = 3c/\omega_p$. Τότε η πλεγματική σταθερά είναι $a = a_0\sqrt{2} = 3\sqrt{2}c/\omega_p$, ενώ η απόσταση μεταξύ των διαδοχικών επιπέδων (001) είναι $d = a_0\sqrt{2}/2$. Αγνοούμε σκόπιμα την απορρόφηση στο μεταλλικό υλικό, θέτοντας $\tau^{-1} = 0$ στην Εξ. (3.1), έτσι ώστε η φωτονική δομή ζωνών να έχει σαφές νόημα. Στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 3.1 δείχνουμε τη φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κάθετα στην επιφάνεια (001) (διεύθυνση [001]). Σημειώνεται ότι η επιφάνεια (001) είναι επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας του κρυστάλλου και κατά συνέπεια οι ζώνες εμφανίζονται σε ζεύγη: $k_z(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})$ και $-k_z(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})$. Για τον λόγο αυτό, στο Σχ. 3.1 δείχνουμε μόνο τις ζώνες για θετικό k_z . Σε χαμηλές συχνότητες παίρνουμε μια διπλά εκφυλισμένη γραμμική σχέση διασποράς, όπως αναμένεται από την εγκάρσια φύση του ΗΜ πεδίου για διάδοση σε ομοιογενές ισοδύναμο μέσο. Σε υψηλότερες συχνότητες εμφανίζονται επίπεδες ζώνες, σχεδόν χωρίς διασπορά, που προέρχονται από καταστάσεις επιφανειακών πλασμονίων των νανοφλοιών. Εξαιτίας της αλληλεπίδρασης ανάμεσα στις εκτεταμένες και τις επίπεδες ζώνες ίδιας συμμετρίας ανοίγουν χάσματα συχνοτήτων, τα οποία θα αποκαλούμε *χάσματα υβριδισμού*, κατ' αναλογία με τον γνωστό από την ηλεκτρονική δομή των μετάλλων υβριδισμό $s-d$ [126]. Ο υβριδισμός είναι ισχυρότερος στην περίπτωση της χαμηλότερης σε συχνότητα ζώνης διπολικού συντονισμού, λόγω της σχετικά μεγαλύτερης χωρικής έκτασης των αντίστοιχων καταστάσεων, και κατά συνέπεια το αντίστοιχο χάσμα έχει μεγαλύτερο εύρος.

Στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 3.1, εκτός από τις συνηθισμένες ζώνες συχνοτήτων (πραγματικές ιδιοτιμές k_z), παρουσιάζουμε και τις γραμμές πραγματικής συχνότητας για μιγαδικές ιδιοτιμές k_z που αντιστοιχούν στις διπλά εκφυλισμένες ζώνες. Οι γραμμές αυτές αποτελούν την αναλυτική συνέχεια των ζωνών στο μιγαδικό επίπεδο k_z [151]. Υπάρχει άπειρος αριθμός τέτοιων ζωνών, αλλά, σε μια περιοχή χάσματος, η μιγαδική ζώνη κατάλληλης συμμετρίας (διπλά εκφυλισμένη στην περίπτωση μας) με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος είναι αυτή που καθορίζει τη διάδοση (ή, πιο σωστά, την εξασθένιση) των ΗΜ κυμάτων σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο του κρυστάλλου κατά τη συγκεκριμένη διεύθυνση. Για τον λόγο αυτό, στο Σχ. 3.1 δείχνουμε στην περιοχή του χάσματος τη διπλά εκφυλισμένη ζώνη με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος (σχεδιασμένο στις σκιασμένες περιοχές) σε



Σχήμα 3.1: Αριστερό διάγραμμα: Η μιγαδική φωτονική δομή ζωνών ενός κρυστάλλου fcc, πλεγματικής σταθεράς $a = 3\sqrt{2}c/\omega_p$, που οικοδομείται ως επαλληλία διαδοχικών επιπέδων (001) από μεταλλικούς νανοφλοιούς με πυρήνα SiO_2 , πάχους $C = 0.3c/\omega_p$ και ακτίνας $S = c/\omega_p$, στον αέρα, κατά τη διεύθυνση [001]. Οι χοντρές και λεπτές γραμμές αντιπροσωπεύουν τις διπλά εκφυλισμένες και μη εκφυλισμένες ζώνες, αντίστοιχα. Στην περιοχή του χάσματος δείχνουμε τη μιγαδική ζώνη με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος σε κάθε συχνότητα: το φανταστικό τους μέρος παρουσιάζεται με συνεχείς γραμμές στις σκιασμένες περιοχές, ενώ το πραγματικό τους μέρος παρουσιάζεται με διακεκομμένες γραμμές στη λευκή περιοχή. Οι εστιγμένες γραμμές παριστούν τη σχέση διασποράς που προκύπτει από το μοντέλο Maxwell - Garnett, Εξ. (3.9) (βλ. επόμενο εδάφιο). Δεξιά διαγράμματα: Οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα πλακίδιο αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου (μαύρες συνεχείς γραμμές), καθώς και ο αντίστοιχος συντελεστής ανάκλασης για τον ημιάπειρο κρύσταλλο (γκρι διακεκομμένη γραμμή).

κάθε συχνότητα. Σε χαμηλές συχνότητες η σχετική ζώνη είναι αυτή που χαρακτηρίζεται από $\text{Re}k_z = \pi/d$, ενώ σε υψηλότερες αυτή που έχει $\text{Re}k_z = 0$.

Στο δεξιό τμήμα του Σχ. 3.1 παρουσιάζουμε τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα πλακίδιο του κρυστάλλου αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001) νανοφλοιών, καθώς και τον συντελεστή ανάκλασης του αντίστοιχου ημιάπειρου κρυστάλλου. Ο συντελεστής διέλευσης, σε αντιπαράβολή με τη χαμηλότερη σε συχνότητα ζώνη, παρουσιάζει τις γνωστές ταλαντώσεις Fabry - Perot [86] που οφείλονται σε πολλαπλή σκέδαση στις επιφάνειες του πλακιδίου. Η περίοδος αυτών των ταλαντώσεων αντιστοιχεί σε $k_z d/\pi = 1/8$, όπως θα περιμέναμε για το δεδομένο πάχος του πλακιδίου (ανοιχτοί κύκλοι στο αριστερό τμήμα του Σχ. 4.1). Στις περιοχές των χασμάτων, καθώς και σε περιοχές συχνοτήτων όπου υπάρχουν μόνο μη εκφυλισμένες ζώνες, ο συντελεστής διέλευσης είναι πρακτικά μηδενικός λόγω της εγκάρσιας φύσης του προσπίπτοντος ΗΜ κύματος: ένα προσπίπτον κύμα υφίσταται ολική ανάκλαση. Σημειώνουμε ότι ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου δεν εμφανίζει ταλαντώσεις Fabry - Perot διότι δεν υπάρχει πίσω επιφάνεια που να προκαλεί τις

πολλαπλές σκεδάσεις.

3.2 Η προσέγγιση Maxwell-Garnett

Ανάμεσα στις μεθόδους ομοιογενοποίησης σύνθετων συστημάτων, εξέχουσα θέση κατέχουν, κυρίως λόγω της απλότητάς τους, οι προσεγγίσεις Maxwell - Garnett [42] και Bruggeman [43]. Και οι δύο μέθοδοι περιγράφουν τη σύνθετη δομή με όρους ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης, ϵ_{eff} , που δεν εξαρτάται ρητά από το μέγεθος ή το σχήμα των επιμέρους συστατικών αλλά μόνο από το ποσοστό του όγκου που καταλαμβάνει το κάθε συστατικό και τη διηλεκτρική του συνάρτηση. Πρόκειται για ημιστατικές θεωρίες, και η ακρίβειά τους περιορίζεται σε δομές με επιμέρους συστατικά πολύ μικρότερα από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

Στην απλή περίπτωση μιας συλλογής από σφαιρικά σωματίδια, ακτίνας S και διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_1 σε ομοιογενές περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ , η συνήθης εξίσωση Maxwell - Garnett είναι

$$\frac{\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon}{\epsilon_{\text{eff}} + 2\epsilon} = f \frac{\epsilon_1 - \epsilon}{\epsilon_1 + 2\epsilon}, \quad (3.2)$$

όπου f είναι ο λόγος κατάληψης των σφαιρών, δηλαδή το κλάσμα του όγκου που καταλαμβάνουν οι σφαίρες προς τον συνολικό όγκο της σύνθετης δομής. Στην εξίσωση αυτή μπορεί να καταλήξει κανείς ξεκινώντας από τη σχέση Clausius - Mosotti [2],

$$\frac{\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon}{\epsilon_{\text{eff}} + 2\epsilon} = \frac{f}{S^3} \alpha, \quad (3.3)$$

όπου α είναι η ηλεκτρική διπολική πολωσιμότητα των σφαιρών, λαμβάνοντας την τιμή της πολωσιμότητας στο ηλεκτροστατικό όριο,

$$\alpha = \frac{\epsilon_1 - \epsilon}{\epsilon_1 + 2\epsilon} S^3. \quad (3.4)$$

Μια επιτυχής επέκταση της προσέγγισης Maxwell - Garnett βασίζεται στη χρήση της ηλεκτρικής και μαγνητικής διπολικής πολωσιμότητας που προκύπτει από τη θεωρία σκέδασης Mie [135]. Παίρνοντας την ηλεκτρική πολωσιμότητα

$$\alpha = i \frac{3S^3}{2(q_1 S)^3} T_{E1}(\omega), \quad (3.5)$$

όπου T_{E1} είναι το διπολικό ηλεκτρικό στοιχείο του πίνακα σκέδασης \mathbf{T} , η Εξ. (3.3) γίνεται

$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{(q_1 S)^3 - 3ifT_{E1}(\omega)}{(q_1 S)^3 + \frac{3}{2}ifT_{E1}(\omega)}, \quad (3.6)$$

και αντίστοιχα για τη μαγνητική διαπερατότητα,

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{(q_1 S)^3 - 3ifT_{H1}(\omega)}{(q_1 S)^3 + \frac{3}{2}ifT_{H1}(\omega)}, \quad (3.7)$$

όπου T_{H1} είναι το διπολικό μαγνητικό στοιχείο του πίνακα σκέδασης \mathbf{T} .

Στην περίπτωση των μεταλλικών νανοφλοιών που μας απασχολούν στο παράδειγμα που εξετάζουμε, είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι, παίρνοντας για το T_{E1} το όριο του μεγάλου μήκους κύματος, η Εξ. (3.6) ανάγεται σε μια προσέγγιση Maxwell - Garnett δύο βημάτων, όπου αρχικά υπολογίζεται μια ενεργός διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ_s , ομοιογενοποιώντας τα σύνθετα μεταλλικά σωματίδια,

$$\frac{\epsilon_s - \epsilon_2}{\epsilon_s + 2\epsilon_2} = \left(\frac{S_1}{S} \right)^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + 2\epsilon_2} \quad (3.8)$$

και στη συνέχεια η ϵ_s χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ϵ_{eff} από τη σχέση

$$\frac{\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon}{\epsilon_{\text{eff}} + 2\epsilon} = f \frac{\epsilon_s - \epsilon}{\epsilon_s + 2\epsilon}. \quad (3.9)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (3.8) και (3.9) καταλήγουμε σε μια αναλυτική έκφραση για την ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$, όπου περιέχονται μόνο οι διηλεκτρικές συναρτήσεις των επιμέρους συνιστωσών της σύνθετης δομής και οι σχετικοί λόγοι κατάληψης, και η οποία έχει συμπεριφορά συντονισμού γύρω από την ιδιοσυχνότητα των διπολικών πλασμονικών καταστάσεων. Αντίθετα, λόγω της ηλεκτρικής φύσης των συντονισμών των μεταλλικών νανοφλοιών, η Εξ. (3.7) δίνει $\mu_{\text{eff}} = 1$. Δεδομένου ότι δεν υπάρχουν απώλειες λόγω απορρόφησης, η ϵ_{eff} είναι πραγματική και έχει ασυμπτωτική συμπεριφορά, παίρνοντας αρνητικές τιμές σε μια περιοχή δίπλα στην ασύμπτωτο. Σε αυτή την περιοχή δεν μπορούν να υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις του HM πεδίου και έχουμε ένα χάσμα συχνοτήτων, μέσα στο οποίο ο κυματάνηθος, $k = \omega \sqrt{\epsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}} / c$, είναι καθαρά φανταστικός ($\text{Re}k = 0$). Όπως φαίνεται στη φωτονική δομή ζωνών του πραγματικού κρυστάλλου, Σχ. 3.1, οι κυρίαρχες φθίνουσες καταστάσεις κοντά στο πάνω όριο του χάσματος αντιστοιχούν όντως σε $\text{Re}k_z = 0$. Κατά συνέπεια, η μορφή της σχετικής περιβάλλουσας κυματοσυνάρτησης Bloch [$\exp(-\text{Im}k_z d)$] είναι συμβατή με τις φθίνουσες καταστάσεις του ισοδύναμου κατά Maxwell - Garnett μέσου στην περιοχή της αρνητικής ϵ_{eff} . Αντίθετα, σε χαμηλότερες συχνότητες μέσα στο χάσμα οι κυρίαρχες φθίνουσες καταστάσεις, που προέρχονται από καταστροφική συμβολή μέσω πολλαπλής σκέδασης στο περιοδικό πλέγμα σχεδαστών, αντιστοιχούν σε $\text{Re}k_z \neq 0$, και τέτοια κύματα δεν μπορούν να περιγραφούν από τη θεωρία Maxwell - Garnett. Επιπλέον, προκειμένου να εισάγει κανείς μακροσκοπικές συναρτήσεις $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$ και $\mu_{\text{eff}}(\omega)$, θα πρέπει το μήκος κύματος μέσα στο υλικό να είναι πολύ μεγαλύτερο από το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας. Συνεπώς, η προσέγγιση γίνεται λιγότερο ακριβής σε έναν φωτονικό κρύσταλλο όταν το κυματόνισμα Bloch \mathbf{k} πλησιάζει στα άκρα της ΖΒ. Αυτό φαίνεται στο Σχ. 3.1, όπου συγκρίνουμε τη σχέση διασποράς στον πραγματικό κρύσταλλο με αυτή που προκύπτει από την προσέγγιση Maxwell - Garnett.

Στην περίπτωση μη σφαιρικών σωματιδίων, και κυρίως στην περίπτωση μεταλλικών νανοδίσκων και νανοκυλίνδρων που θα μας απασχολήσουν στα επόμενα κεφάλαια, λόγω της ανισοτροπίας των σωματιδίων η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση και η ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα είναι τανυστές. Η θεωρία Maxwell - Garnett που περιγράψαμε παραπάνω υπολογίζει βαθμωτές ισοδύναμες παραμέτρους και είναι προφανώς ανεπαρκής. Στην περίπτωση νανοκυλίνδρων, προσανατολισμένων, χωρίς βλάβη της γενικότητας, με τον άξονά τους κατά τη διεύθυνση z , μια διαδεδομένη προσέγγιση είναι να υποθέτει κανείς ότι οι νανοκύλινδροι έχουν άπειρο ύψος και να εφαρμόζει τις αντίστοιχες 2Δ θεωρίες Maxwell - Garnett ή Bruggeman,

σύμφωνα, για παράδειγμα, με τη σχέση [133,152]

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)} &= \varepsilon + \frac{f\varepsilon(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon + (1-f)(\varepsilon_1 - \varepsilon)L_{\parallel}} \\ \varepsilon_{\text{eff}(z)} &= f\varepsilon_1 + (1-f)\varepsilon,\end{aligned}\quad (3.10)$$

όπου ο δείκτης \parallel συμβολίζει συλλογικά τις ισοδύναμες διευθύνσεις x και y , και L είναι ο παράγοντας αποπόλωσης,

$$L_{\parallel} = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi}{\lambda} S \right)^2 - \frac{2}{9} \left(\frac{2\pi}{\lambda} S \right)^3 i. \quad (3.11)$$

Στην τελευταία σχέση, λ είναι το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας και S η ακτίνα της διατομής του κυλίνδρου. Οι θεωρίες αυτές αποτυγχάνουν προφανώς να προβλέψουν συντονισμούς στη συνιστώσα $\varepsilon_{\text{eff}(z)}$ της διηλεκτρικής συνάρτησης. Συνεπώς, είναι απαραίτητη η χρήση γενικεύσεων της θεωρίας Maxwell - Garnett που να λαμβάνουν υπόψη το πεπερασμένο μήκος των νανοκυλίνδρων [153]. Έχει αποδειχθεί αριθμητικά ότι, στην περίπτωση των νανοκυλίνδρων, αλλά και των νανοδίσκων που θα μας απασχολήσουν στη συνέχεια, αυτό που έχει πραγματικά σημασία είναι ο λόγος της διαμέτρου, D , προς το ύψος, H , και όχι το ακριβές σχήμα του σωματιδίου. Τα σωματίδια αυτά προσεγγίζονται τότε ικανοποιητικά από ελλειψοειδή, με ίδιο μέγεθος και προσανατολισμό [154]. Η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση μιας σύνθετης δομής ελλειψοειδών διηλεκτρικής συνάρτησης ε_1 σε ομοιογενές περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε δίνεται από την [155]

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}(i)} - \varepsilon}{\varepsilon_{\text{eff}(i)} + 2\varepsilon} = \frac{f}{3} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + L_i(\varepsilon_1 - \varepsilon)} = \frac{4\pi f}{V} \alpha_i, \quad (3.12)$$

όπου ο δείκτης i αναφέρεται στον άξονα, x , y , ή z , V είναι ο όγκος του ελλειψοειδούς, ενώ f , α και L είναι κατά τα γνωστά ο λόγος κατάληψης, η πολωσιμότητα, και ο παράγοντας αποπόλωσης, αντίστοιχα. Έχει δειχθεί ωστόσο ότι η Εξ. (3.12) οδηγεί σε λανθασμένα αποτελέσματα όταν $L_i \simeq 0$ ή $L_i \simeq 1$, και έχει προταθεί η ακόλουθη εναλλακτική μορφή [156]

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}(i)} - \varepsilon}{\varepsilon + L_i(\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon)} = f \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon + L_i(\varepsilon_1 - \varepsilon)}. \quad (3.13)$$

Στις παραπάνω εξίσωση, ο παράγοντας αποπόλωσης δίνεται από τη σχέση [2]

$$\begin{aligned}L_x &= L_y (\equiv L_{\parallel}) = \frac{1 - L_z}{2} \\ L_z &= \frac{1 - e^2}{e^2} \left[\frac{1}{2e} \ln\left(\frac{1+e}{1-e}\right) - 1 \right],\end{aligned}\quad (3.14)$$

όπου $e^2 = 1 - D^2/H^2$.

3.3 Ομοιογενοποίηση πλακιδίου με τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης

Η μέθοδος ομοιογενοποίησης ενός σύνθετου πλακιδίου αποτελούμενου από (περιοδικά) διατεταγμένους σχεδαστές μέσω αντίστροφης σκέδασης, ή μέθοδος ομοιογενοποίησης μέσω του πίνακα σκέδασης \mathbf{S} , είναι μια από τις δημοφιλέστερες μεθόδους υπολογισμού ισοδύναμων ΗΜ παραμέτρων [44,45,47]. Όπως είδαμε, ο πίνακας \mathbf{S} μετασχηματίζει το προσπίπτον στο εξερχόμενο πεδίο: η μορφή του, ακολουθώντας τον φορμαλισμό της μεθόδου LMS, είναι αυτή της Εξ. (2.116). Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι ότι ένα υποθετικό ομοιογενές πλακίδιο, πάχους h , μιμείται το ανομοιογενές σύνθετο πλακίδιο υπό την έννοια ότι, σε αρκετά μακρινή απόσταση, οι δύο δομές παράγουν το ίδιο εξερχόμενο πεδίο. Αυτό δεν σημαίνει ότι οι ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι, ε_{eff} και μ_{eff} , που υπολογίζει κανείς περιγράφουν το κυματικό πεδίο μέσα στην πραγματική ανομοιογενή δομή, στην οποία σε κάθε συχνότητα το πεδίο έχει μορφή Bloch και όχι επίπεδου κύματος. Ωστόσο, οι ισοδύναμες παράμετροι θα πρέπει να είναι τέτοιες ώστε και τα δύο κύματα να υπακούουν στην ίδια σχέση διασποράς και, κατά συνέπεια, να έχουν την ίδια ταχύτητα ομάδος (και φάσης). Προφανώς, αυτή η παρατήρηση έχει νόημα μόνο αν στη δεδομένη συχνότητα υπάρχει μία και μοναδική κατάσταση Bloch. Επιπλέον, προκειμένου να μπορεί να εφαρμοστεί μια περιγραφή ομοιογενούς ισοδύναμου μέσου, θα πρέπει το μήκος κύματος στο περιβάλλον μέσο να είναι πολύ μεγαλύτερο από τις διαστάσεις των σωματιδίων και τη μεταξύ τους απόσταση στο περιοδικό πλέγμα. Η απαίτηση αυτή εξασφαλίζει ότι θα υπάρχει μία μόνο διαδιδόμενη κατάσταση του σχεδασμένου ΗΜ πεδίου, για $\mathbf{g} = \mathbf{0}$, που αντιστοιχεί σε εξερχόμενα κύματα (ανακλώμενες και διαθλώμενες ακτίνες). Όλες οι άλλες συνιστώσες του κυματικού πεδίου (περιθλώμενες ακτίνες) θα είναι φθίνουσες. Ωστόσο, αν και ο περιορισμός στο τμήμα του πίνακα \mathbf{S} , Εξ. (2.116), με $\mathbf{g} = \mathbf{0}$ είναι αρκετός για να πάρει κανείς το σχεδασμένο πεδίο μακριά από ένα πεπερασμένο πλακίδιο της δεδομένης δομής, εν γένει πρέπει να υπολογίζεται ολόκληρος ο πίνακας \mathbf{S} , ώστε να λαμβάνεται υπόψη η αλληλεπίδραση μεταξύ διαδοχικών επιπέδων, που λαμβάνει χώρα μέσω του κοντινού πεδίου, σε ένα πλακίδιο αποτελούμενο από πολλαπλά επίπεδα. Από την άλλη, όταν το υπό μελέτη πλακίδιο διαθέτει ένα παράλληλο επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας, όπως συμβαίνει με το επίπεδο (001) του κρυστάλλου που εξετάζουμε στο παράδειγμά μας, και η οπτική του απόκριση σε κάθετη πρόσπτωση είναι ανεξάρτητη της πόλωσης, δύο στοιχεία του πίνακα \mathbf{S} , τα $S_{01;01}^{++}$ και $S_{01;01}^{+-}$, είναι αρκετά για την περιγραφή της σκέδασης. Τότε τα στοιχεία αυτά αντιστοιχούν στους μιγαδικούς συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης, t και r , αντίστοιχα, και ο πίνακας \mathbf{S} παίρνει την απλή μορφή

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} t & r \\ r & t \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Δεδομένου ότι για λόγους διατήρησης της ροής ο πίνακας \mathbf{S} είναι μοναδιακός, οι ιδιοτιμές του, $t + r$ και $t - r$, γράφονται

$$t + r = \exp(i2\delta_+) , \quad t - r = \exp(i2\delta_-) , \quad (3.16)$$

όπου δ_+ , δ_- , είναι οι φασικές μετατοπίσεις της σκέδασης, οι οποίες είναι πραγματικές συναρτήσεις της συχνότητας.

Στη γενική περίπτωση, το προς ομοιογενοποίηση πλακίδιο βρίσκεται μεταξύ δύο ομοιογενών μέσων, '1' και '3', που περιγράφονται από εμπεδήσεις z_1 , z_3 , και δείκτες διάθλασης n_1 ,

n_3 , αντίστοιχα, όπου η εμπέδηση ενός ομοιογενούς μέσου ορίζεται ως $z = \sqrt{\mu/\epsilon}$. Αντιστρέφοντας τις εξισώσεις του Fresnel [Εξ. (1.42)] για ένα ισοδύναμο ομοιογενές πλακίδιο που περιγράφεται από δείκτη διάθλασης n_{eff} και εμπέδηση z_{eff} παίρνουμε (για κάθετη πρόσπτωση) [30]

$$z_{\text{eff}} = \pm \frac{\sqrt{(r-1)^2 - t^2}}{\sqrt{(r+1)^2 z_3^2 - t^2 z_1^2}} z_1 z_3 \quad (3.17)$$

και

$$\tan(\beta/2) = \pm i \frac{\sqrt{(r-1+t)[z_3(r+1) - tz_1]}}{\sqrt{(r-1-t)[z_3(r+1) + tz_1]}} , \quad (3.18)$$

αντίστοιχα, όπου $\beta = \omega n_{\text{eff}} h/c$. Για ένα πλακίδιο στον αέρα οι παραπάνω εξισώσεις απλοποιούνται στις [44]

$$z_{\text{eff}} = \pm \frac{\sqrt{(r-1)^2 - t^2}}{\sqrt{(r+1)^2 - t^2}} \quad (3.19)$$

και

$$\tan(\beta/2) = \pm i \sqrt{\frac{r^2 - (1-t)^2}{r^2 - (1+t)^2}} , \quad (3.20)$$

αντίστοιχα. Το πρόσημο της εμπέδησης στις Εξ. (3.17) και (3.19) καθορίζεται από την απαίτηση $\text{Re}z_{\text{eff}} > 0$, που ισχύει για ένα υλικό με απώλειες. Επιπλέον, προκειμένου να εξασφαλιστεί ότι το εξερχόμενο κύμα θα φθίνει εκθετικά, πρέπει $\text{Im}n_{\text{eff}} > 0$, που καθορίζει το πρόσημο στις Εξ. (3.18) και (3.20). Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (3.16), οι Εξ. (3.19) και (3.20) γράφονται στις εναλλακτικές μορφές

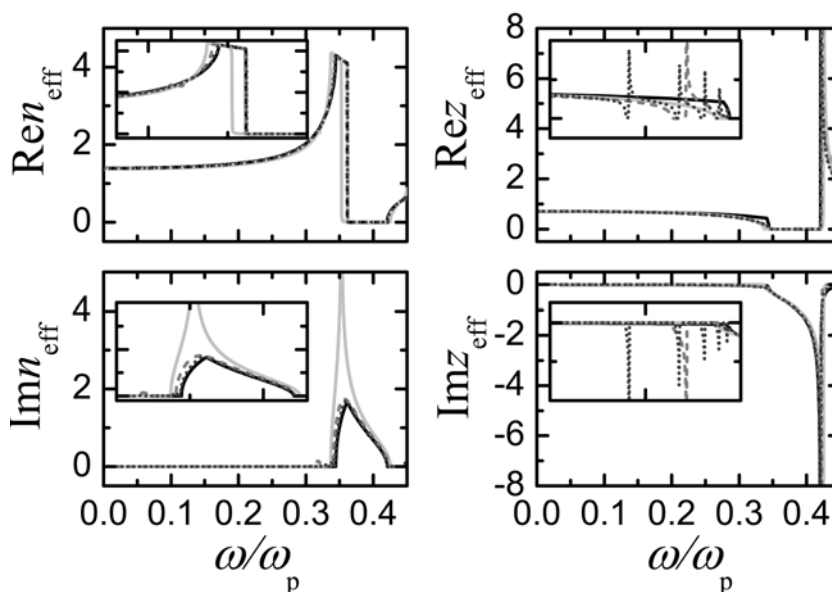
$$z_{\text{eff}} = \pm \sqrt{\frac{\tan \delta_+}{\tan \delta_-}} \quad (3.21)$$

και

$$\tan(\beta/2) = \pm i \sqrt{\tan \delta_+ \tan \delta_-} , \quad (3.22)$$

αντίστοιχα. Η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση και η ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα του πλακιδίου προκύπτουν από τις σχέσεις $\epsilon_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}/z_{\text{eff}}$ και $\mu_{\text{eff}} = n_{\text{eff}} z_{\text{eff}}$. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να επισημάνουμε ότι, επειδή η μέθοδος αντιστροφής σκέδασης βασίζεται στην αντιστροφή των εξισώσεων του Fresnel, που περιγράφουν τη σκέδαση για πρόσπτωση υπό συγκεκριμένη γωνία, οι αντίστοιχες ισοδύναμες παράμετροι ισχύουν μόνο γι' αυτή τη γωνία. Η μέθοδος αναπτύχθηκε για την απλή περίπτωση της κάθετης πρόσπτωσης [44], ενώ πρόσφατα επεκτάθηκε για πρόσπτωση υπό τυχαία γωνία [146].

Επιστρέφοντας στο παράδειγμα που εξετάζουμε, δεδομένου ότι θεωρούμε τον κρύσταλλο fcc σαν επαλληλία από N_L επίπεδα (001), τα όρια κάθε επιπέδου μπορούν να ορισθούν σε απόσταση $d/2$ από το κέντρο του, στα αριστερά και τα δεξιά του επιπέδου των σχεδαστών, οπότε το πάχος κάθε επιπέδου μπορεί να θεωρηθεί ίσο με d . Με αυτό τον τρόπο εξασφαλίζεται ότι η εμπέδηση για διάφορα πάχη $h = N_L d$ του ισοδύναμου πλακιδίου είναι σταθερή, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2. Αυτή είναι μια απαραίτητη συνθήκη προκειμένου να μπορούμε να



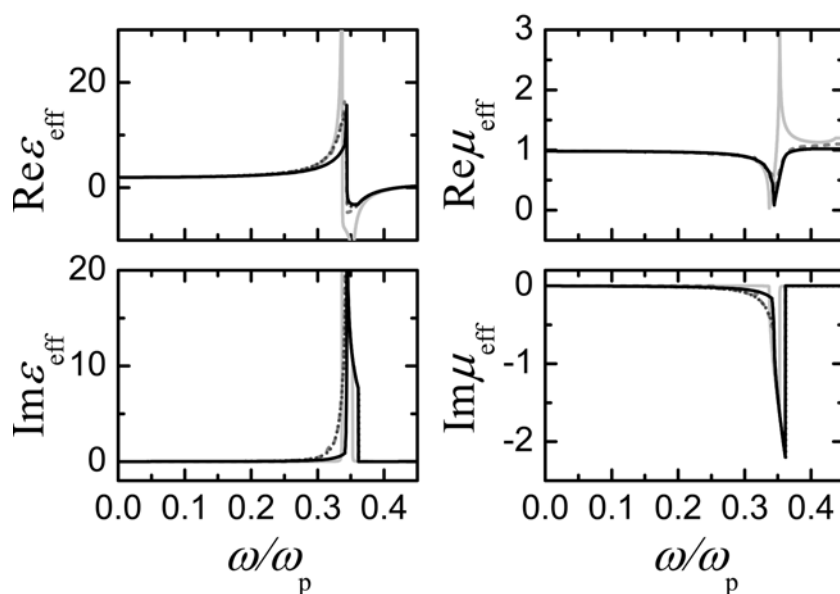
Σχήμα 3.2: Πραγματικό και φανταστικό μέρος του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης και της ισοδύναμης εμπέδησης για πλακίδια αποτελούμενα από ένα (ανοιχτές γκρι συνεχείς γραμμές), δύο (γκρι διακεκομμένες γραμμές) και οκτώ (σκούρες γκρι εστιγμένες γραμμές) επίπεδα (001) του κρυστάλλου μεταλλικών νανοφλοιών που εξετάζουμε. Η μαύρες συνεχείς γραμμές δείχνουν τα αποτελέσματα για τον αντίστοιχο άπειρο κρύσταλλο. Στα ένθετα δείχνουμε μεγεθύνσεις των αντίστοιχων διαγραμμάτων σε περιοχές ιδιαίτερου ενδιαφέροντος.

αποδώσουμε τιμές στις παραμέτρους ϵ_{eff} και μ_{eff} που να περιγράφουν το υλικό ανεξαρτήτως πάχους [44,45,47]. Πρέπει να σημειωθεί ότι η εμπέδηση, όπως υπολογίζεται από τις Εξ. (3.19) ή (3.21), μπορεί να παρουσιάζει αφύσικες δομές συντονισμού γύρω από τις συχνότητες των συντονισμών Fabry-Perot, ω_i , όπως δείχνουμε στο Σχ. 3.2. Αυτές οι δομές, που αυξάνονται ανάλογα με τον αριθμό των επιπέδων που συνθέτουν το μεταλλικό, έχουν παρατηρηθεί σε πολλές εργασίες [45,157], αλλά μόνο πρόσφατα δόθηκε ερμηνεία της προέλευσής τους [147, 149]. Η παρουσία τέτοιων δομών στις συγκεκριμένες θέσεις του φάσματος εξηγείται ως ακολούθως: Στις θέσεις ω_i ισχύει $t = 1$ και $r = 0$, ή, ισοδύναμα, $\tan \delta_+(\omega_i) = 0$ και $\tan \delta_-(\omega_i) = 0$. Συνεπώς, κοντά στις συχνότητες ω_i μπορούμε να γράψουμε $\tan \delta_+(\omega) \cong A_1(\omega - \omega_i) + A_2(\omega - \omega_i)^2$ και $\tan \delta_-(\omega) \cong B_1(\omega - \omega_i) + B_2(\omega - \omega_i)^2$, όπου τα A_1 , A_2 , B_1 και B_2 είναι κατάλληλοι συντελεστές ανάπτυξης, και από την Εξ. (3.21) παίρνουμε

$$z_{\text{eff}}^2 \cong \frac{A_1}{B_1} + \left(\frac{A_2}{B_1} - \frac{A_1 B_2}{B_1^2} \right) (\omega - \omega_i), \quad (3.23)$$

δηλαδή η z_{eff} θα πρέπει να μεταβάλλεται ομαλά με τη συχνότητα γύρω από τις θέσεις ω_i . Ωστόσο, στους πραγματικούς υπολογισμούς, λόγω αριθμητικών ανακρίβειών (ή πειραματικών σφαλμάτων), οι ρίζες των $\tan \delta_+(\omega)$ και $\tan \delta_-(\omega)$ μπορεί να είναι ελαφρώς διαφορετικές, για παράδειγμα $\tan \delta_+(\omega_i + \Delta\omega_i) = 0$ και $\tan \delta_-(\omega_i) = 0$. Ως αποτέλεσμα, στην περίπτωση αυτή εμφανίζεται στο ανάπτυγμα της $z_{\text{eff}}^2(\omega)$ ένας επιπλέον, μη αναλυτικός όρος, τάξης $1/(\omega - \omega_i)$,

γύρω από τη θέση ω_i , που οδηγεί στις έντονες αυτές δομές σε ένα ομοιογενές υπόβαθρο, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2. Οι δομές αυτές μπορούν να αφαιρεθούν αριθμητικά [149], ή έχοντας ως οδηγό την εμπέδηση του ημιάπειρου κρυστάλλου, $z_\infty = z_1(1 + r_\infty)/(1 - r_\infty)$ όπου r_∞ είναι ο μιγαδικός συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου. Όπως εξηγήσαμε στο Εδ. 3.1, ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου δεν εμφανίζει ταλαντώσεις Fabry-Perot, και κατά συνέπεια η z_∞ είναι απαλλαγμένη από τέτοιες αναληθείς δομές, όπως δείχνουμε στο Σχ. 3.2 [158].



Σχήμα 3.3: Πραγματικό και φανταστικό μέρος της ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας για πλακίδια αποτελούμενα από ένα (ανοιχτές γκρι συνεχείς γραμμές), δύο (γκρι διακεκομμένες γραμμές) και οκτώ (σκούρες γκρι εστιγμένες γραμμές) επίπεδα (001) του κρυστάλλου μεταλλικών νανοφλοιών που εξετάζουμε. Οι μαύρες συνεχείς γραμμές δείχνουν τα αποτελέσματα για τον αντίστοιχο άπειρο κρύσταλλο.

Ο προσδιορισμός του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης είναι συχνά ασαφής λόγω των πολλαπλών κλάδων της συνάρτησης εφαπτομένης που εμφανίζεται στις Εξ. (3.20) ή (3.22). Για ένα πλακίδιο μικρού πάχους, και ειδικά για ένα και μοναδικό επίπεδο σκεδαστών, συνήθως υπεισέρχεται στον υπολογισμό μόνο ο θεμελιώδης κλάδος. Για παχύτερα πλακίδια ωστόσο, οι ανώτεροι κλάδοι μπορεί να βρίσκονται αρκετά κοντά μεταξύ τους, κάνοντας την επιλογή του κατάλληλου κλάδου δύσκολη [44–46], ενώ ο προσδιορισμός του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης μπορεί να περιπλεχθεί περισσότερο από πιθανές ασυνέχειες λόγω των συντονισμών. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το ζήτημα εισάγουμε τον δείκτη διάθλασης που προκύπτει από τη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του αντίστοιχου άπειρου κρυστάλλου, $c(\text{Re}k_z + i\text{Im}k_z)/\omega$, ως οδηγό για την επιλογή του κατάλληλου κλάδου, ειδικά στην περίπτωση πλακιδίων μεγάλου πάχους. Στο Σχ. 3.2 δείχνουμε τον ισοδύναμο δείκτη διάθλασης για πλακίδια αποτελούμενα από ένα, δύο, και οκτώ επίπεδα νανοφλοιών του κρυστάλλου που εξετάζουμε, μαζί με τον αντίστοιχο δείκτη διάθλασης που προκύπτει από τη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του Σχ.

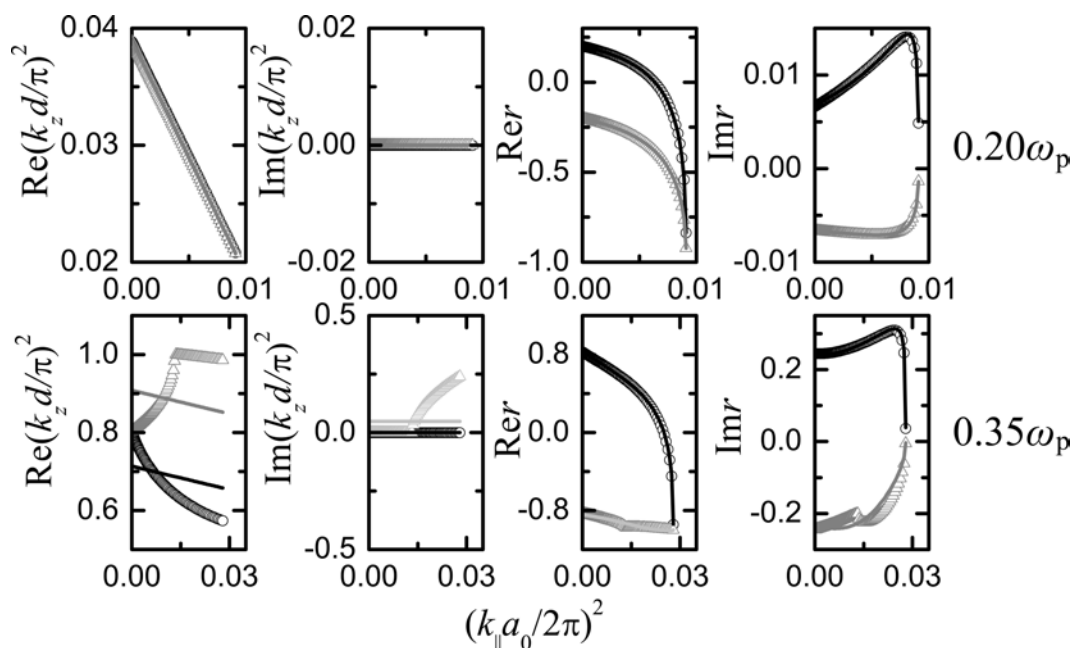
3.1. Είναι φανερό ότι η σύγκλιση στα αποτελέσματα του άπειρου κρυστάλλου γίνεται πολύ γρήγορα, ήδη για λεπτά πλακίδια.

Στο Σχ. 3.3 παρουσιάζουμε την ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ_{eff} , και την ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα, μ_{eff} , όπως υπολογίζονται από τις z_{eff} και n_{eff} για πλακίδια ενός, δύο, και οκτώ επιπέδων νανοφλοιών, καθώς και για τον άπειρο κρύσταλλο. Εκτός από τον ισχυρό συντονισμό της ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης που αναμέναμε λόγω της φύσης των σχεδιαστών, παρατηρούμε και έναν 'αντισυντονισμό' στην ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα. Η συμπεριφορά αυτή είναι συστηματική και έχει παρατηρηθεί και από άλλους [44, 45, 47, 159]. Επιπλέον, παρότι ο κρύσταλλος αποτελείται από δομικές μονάδες που δεν απορροφούν, με πραγματικές συναρτήσεις απόκρισης, η μέθοδος ομοιογενοποίησης του πίνακα \mathbf{S} οδηγεί σε μη μηδενικά φανταστικά μέρη, τόσο για την ϵ_{eff} όσο και για την μ_{eff} , στην περιοχή του συντονισμού. Ωστόσο, η μέθοδος η ίδια εξασφαλίζει ότι οι τιμές των ϵ_{eff} και μ_{eff} είναι τέτοιες ώστε η απορρόφηση να είναι μηδενική για κάθε πλακίδιο, σε κάθε συχνότητα. Κατά κάποιον τρόπο, δεν είναι δυνατό να ικανοποιηθεί η απαίτηση το ισοδύναμο πλακίδιο να αναπαράγει ακριβώς τα φάσματα διέλευσης και ανάκλασης του πραγματικού πλακιδίου του μεταύλικού με πραγματικές συναρτήσεις $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$ και $\mu_{\text{eff}}(\omega)$. Για να επιτευχθεί αυτή η απαίτηση χρειάζεται να λάβει κανείς συναρτήσεις με $\text{Im}\epsilon_{\text{eff}} > 0$ και $\text{Im}\mu_{\text{eff}} < 0$, δηλαδή κάποιες εικονικές απώλειες που εξισορροπούνται από εικονική ενίσχυση. Προφανώς, αυτές οι τιμές προκύπτουν κάθε φορά για το δεδομένο πάχος πλακιδίου, δεδομένα χαρακτηριστικά του προσπίπτοντος κύματος, κλπ, και κατά συνέπεια οι ϵ_{eff} και μ_{eff} δεν έχουν το νόημα ρεαλιστικών συναρτήσεων απόκρισης.

3.4 Ομοιογενοποίηση άπειρου κρυστάλλου

Ένα ομοιογενές μέσο, ιστροπικό ή ανιστροπικό, περιγράφεται από κατάλληλες σχέσεις διασποράς (που, όπως είδαμε στο Εδ. 1.2 μπορεί να είναι διαφορετικές ανάλογα με την πόλωση), ενώ η πρόσπτωση ΗΜ ακτινοβολίας στην επιφάνεια ενός ημιάπειρου τέτοιου μέσου περιγράφεται από κατάλληλους συντελεστές ανάκλασης. Οι σχέσεις αυτές εξαρτώνται εν γένει από τη γωνία πρόσπτωσης. Για να θεωρηθεί όμως μια περιοδική φωτονική δομή ως πραγματικά ομοιογενές μέσο, θα πρέπει οι ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι που την περιγράφουν να είναι ανεξάρτητες από τη γωνία.

Η μέθοδος ομοιογενοποίησης με βάση τον άπειρο κρύσταλλο [40] βασίζεται στα παρακάτω βήματα: Πραγματοποιώντας υπολογισμούς της μιγαδικής φωτονικής δομής ζωνών για έναν άπειρο κρύσταλλο και του συντελεστή ανάκλασης για τον αντίστοιχο ημιάπειρο κρυστάλλο, για πολλές τιμές του k_{\parallel} κατά μήκος πολλών διευθύνσεων στην ΕΖΒ του κρυστάλλου και για τις δύο πολώσεις, TE και TM, παίρνουμε ένα πλήθος δεδομένων που αναφέρονται στον πραγματικό κρύσταλλο. Τα δεδομένα αυτά θα πρέπει να ικανοποιούν τις σχέσεις διασποράς και του συντελεστή ανάκλασης του ομοιογενούς μέσου με το οποίο θέλουμε να εξομοιώσουμε τον κρύσταλλο. Για τον λόγο αυτό πραγματοποιούμε προσαρμογές των δεδομένων στις αντίστοιχες αναλυτικές εξισώσεις. Ένα τέτοιο παράδειγμα προσαρμογών δείχνουμε στο Σχ. 3.4 για τον φωτονικό κρύσταλλο μεταλλικών νανοφλοιών που εξετάζουμε. Το πλέγμα fcc είναι το πιο ιστροπικό από τα γνωστά κρυσταλλογραφικά πλέγματα, ενώ και οι σχεδιαστές έχουν σφαιρική συμμετρία. Περιμένουμε λοιπόν ότι ο κρύσταλλος αυτός θα συμπεριφέρεται, μέχρι κάποια περιοχή συχνοτήτων, σε καλή προσέγγιση ως ομοιογενές και ισότροπο μέσο, και θα ικανοποιεί τη σχέση διασποράς $\omega = cq/\sqrt{\epsilon_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}}$ και τις σχέσεις για τον συντελεστή



Σχήμα 3.4: Καμπύλες προσαρμογής (συνεχείς γραμμές) σε δεδομένα (ανοιχτά σύμβολα) για τη σχέση διασποράς (αριστερά διαγράμματα) και τον συντελεστή ανάκλασης (δεξιά διαγράμματα) του φωτονικού κρυστάλλου μεταλλικών νανοφλοιών που εξετάζουμε, στην περιοχή γραμμικής σχέσης διασποράς ($\omega = 0.20\omega_p$) (πάνω διαγράμματα) και στα όρια του φωτονικού χάσματος ($\omega = 0.35\omega_p$) (κάτω διαγράμματα). Τα μαύρα και γκρι σύμβολα αντιστοιχούν στις πολώσεις TM και TE, αντίστοιχα.

ανάκλασης (1.37) και (1.40). Οι σχέσεις αυτές είναι βολικό να ξαναγραφούν ως συναρτήσεις του \mathbf{q}_{\parallel} ,

$$q_{(\text{TE})z}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} - q_{\parallel}^2 \quad (3.24)$$

$$q_{(\text{TM})z}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} - q_{\parallel}^2$$

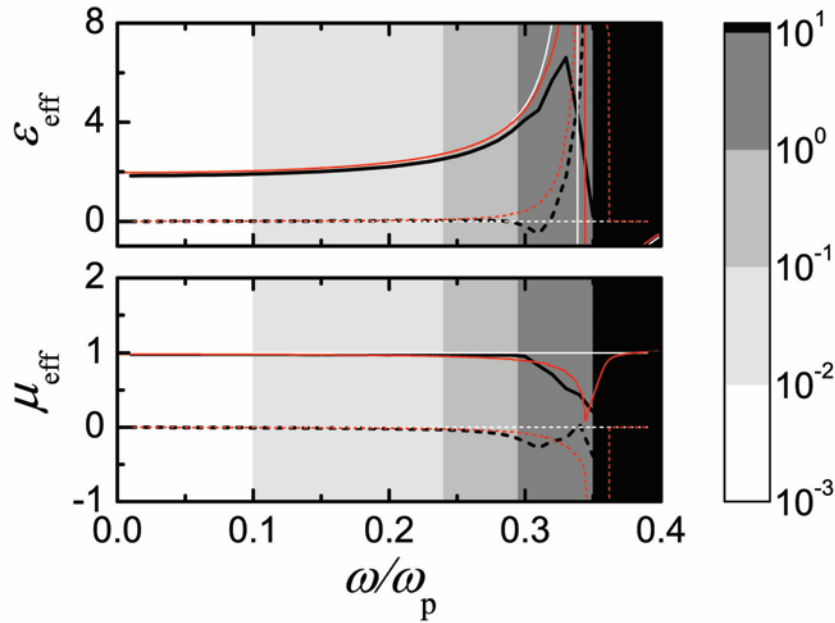
και

$$r_{12(\text{TE})} = \frac{\mu_{\text{eff}} \sqrt{\varepsilon \mu \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2} - \mu \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2}}{\mu_{\text{eff}} \sqrt{\varepsilon \mu \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2} + \mu \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2}} \quad (3.25)$$

$$r_{12(\text{TM})} = \frac{\varepsilon_{\text{eff}} \sqrt{\varepsilon \mu \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2} - \varepsilon \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2}}{\varepsilon_{\text{eff}} \sqrt{\varepsilon \mu \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2} + \varepsilon \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} \omega^2 / c^2 - q_{\parallel}^2}}$$

Η φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου παρουσιάστηκε στο Σχ. 3.1. Στην περιοχή της γραμμικής σχέσης διασποράς περιμένουμε ο κρύσταλλος να συμπεριφέρεται με πολύ καλή

προσέγγιση ως ομοιογενές μέσο. Πράγματι, στα πάνω διαγράμματα του Σχ. 3.4 βλέπουμε ότι για συχνότητα $0.20\omega_p$, που ανήκει σε αυτή την περιοχή, η προσαρμογή των δεδομένων των ακριβών υπολογισμών στις αναλυτικές εξισώσεις (3.24) και (3.25) είναι εξαιρετική. Αντίθετα, στη συχνότητα $0.35\omega_p$, που αντιστοιχεί στα όρια της ZB και πολύ κοντά στο χάσμα, ο κρύσταλλος δεν μπορεί να περιγραφεί με όρους τοπικών συναρτήσεων απόκρισης και οι προσαρμογές των δεδομένων στις αναλυτικές εξισώσεις αποτυγχάνουν. Από τη διαδικασία προσαρμογής παίρνουμε τέσσερις τιμές σε κάθε συχνότητα για το γινόμενο $\epsilon_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}$, καθώς και από μία τιμή για τις μεμονωμένες παραμέτρους ϵ_{eff} και μ_{eff} . Με αυτές καταstrώνουμε ένα σύστημα έξι εξισώσεων ως προς τους αγνώστους ϵ_{eff} και μ_{eff} , το οποίο επιλύουμε αριθμητικά με μια δεύτερη (μη γραμμική) διαδικασία ελαχίστων τετραγώνων, για να καταλήξουμε στις ισοδύναμες HM παραμέτρους που δείχνουμε στο Σχ. 3.5. Η ταύτιση των τεσσάρων ανεξάρτητων τιμών για το γινόμενο $\epsilon_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}$ που προκύπτουν από την πρώτη διαδικασία προσαρμογής, καθώς και η ποιότητα όλων των προσαρμογών, ποσοτικό μέτρο της οποίας είναι η μέση τυπική απόκλιση, η οποία στο σχήμα παρουσιάζεται σε λογαριθμική κλίμακα σε αποχρώσεις του γκρι, αποτελούν ισχυρά εσωτερικά κριτήρια για τον έλεγχο της ακρίβειας των υπολογισμένων ισοδύναμων παραμέτρων.



Σχήμα 3.5: Ισοδύναμες HM παράμετροι (το πραγματικό και φανταστικό τους μέρος συμβολίζεται με συνεχείς και διακεκομμένες γραμμές, αντίστοιχα) για τον κρύσταλλο μεταλλικών νανοφλοιών που εξετάζουμε. Η τυπική απόκλιση των διαδικασιών προσαρμογής παρουσιάζεται στις σκιασμένες περιοχές σε λογαριθμική κλίμακα. Στις μαύρες περιοχές οι ισοδύναμες HM παράμετροι δεν έχουν νόημα. Οι λεπτές άσπρες και κόκκινες γραμμές δείχνουν τις ισοδύναμες παραμέτρους που προκύπτουν από τη μέθοδο Maxwell - Garnett και τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης για πλακίδιο οκτώ επιπέδων νανοφλοιών, αντίστοιχα.

Τα πλεονεκτήματα της μεθόδου που περιγράψαμε παραπάνω είναι πολλά. Η μέθοδος μπορεί να περιγράψει, εξίσου καλά, τόσο ισοτροπικές όσο και ανισοτροπικές δομές (όπως θα δούμε και στα επόμενα κεφάλαια). Επίσης, μπορεί να προσδιορίσει τοπικές ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους, θεωρώντας ότι ένα υποθετικό ομοιογενές μέσο θα έχει την ίδια οπτική συμπεριφορά με τον πραγματικό κρύσταλλο, υπό την έννοια ότι αφενός η διάδοση του φωτός σε οποιαδήποτε διεύθυνση μέσα στα δύο μέσα θα υπακούει στις ίδιες σχέσεις διασποράς και αφετέρου ότι ένα κύμα που προσπίπτει στα δύο μέσα υπό οποιαδήποτε γωνία θα δίνει τον ίδιο συντελεστή ανάκλασης. Απαιτείται συνεπώς η ταυτόχρονη ικανοποίηση μεγάλου αριθμού εξισώσεων, μεγαλύτερου από τον αριθμό των παραμέτρων προς προσδιορισμό, γεγονός που θέτει αυστηρά κριτήρια για τον έλεγχο της ακρίβειας των αποτελεσμάτων. Τα κριτήρια αυτά μάλιστα ποσοτικοποιούνται, μέσω της τυπικής απόκλισης των διαδικασιών προσαρμογής. Αντίστοιχες μέθοδοι, που όμως βασίζονται μόνο σε δεδομένα για τον συντελεστή ανάκλασης [144], ή τη σχέση διασποράς [160], και συνεπώς στην περίπτωση ανισοτροπικών υλικών χρειάζεται να υποθέσουν γνωστές κάποιες από τις παραμέτρους που υπεισέρχονται, έχουν επίσης παρουσιαστεί πρόσφατα. Τέλος, θα πρέπει να σημειώσουμε ότι, όπως και στην περίπτωση της ομοιογενοποίησης με τη μέθοδο αντίστροφης σχέδασης, οι παράμετροι που υπολογίζονται δεν περιγράφουν το ακριβές πεδίο μέσα στον πραγματικό κρύσταλλο, το οποίο έχει μορφή Bloch και όχι απλού επίπεδου κύματος. Φυσικά, για να μπορεί να εφαρμοστεί η μέθοδος ομοιογενοποίησης, θα πρέπει να υπάρχει μία μοναδική κατάσταση Bloch, και να βρισκόμαστε στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος, έτσι ώστε να υπάρχει μία μόνο διαδιδόμενη κατάσταση του ανακλώμενου πεδίου, για $\mathbf{g} = \mathbf{0}$. Όλες οι άλλες συνιστώσες του ΗΜ πεδίου, που αντιστοιχούν σε περιθλώμενες ακτίνες, θα πρέπει να είναι φθίνουσες.

Κεφάλαιο 4

Περιοδικές δομές μεταλλικών νανοφλοιών

Οι μεταλλικοί νανοφλοιοί είναι σύνθετα σφαιρικά σωματίδια, αποτελούμενα από έναν διηλεκτρικό πυρήνα διαμέτρου μερικών δεκάδων νανομέτρων καλυμμένο από έναν λεπτό μεταλλικό φλοιό πάχους μερικών νανομέτρων. Τα σωματίδια αυτά χαρακτηρίζονται από εντυπωσιακές οπτικές ιδιότητες, όπως είναι ο ισχυρός εντοπισμός του τοπικού ΗΜ πεδίου και η ενίσχυση της απορρόφησης, ιδιότητες που πηγάζουν από τη διέγερση εντοπισμένων πλασμονικών καταστάσεων [31]. Τα φάσματα των πλασμονικών καταστάσεων των μεταλλικών νανοφλοιών είναι πολύ πιο πλούσια από αυτά των αντίστοιχων ομοιογενών μεταλλικών σωματιδίων [161], διότι μπορούν να διεγερθούν ταυτόχρονα πλασμονικές καταστάσεις σωματιδίου (εντοπισμένες στην εξωτερική επιφάνεια του φλοιού) και κοιλότητας (εντοπισμένες στην εσωτερική επιφάνεια του φλοιού), οι οποίες αλληλεπιδρούν μεταξύ τους δίνοντας υβριδικές καταστάσεις, σε χαμηλότερες (καταστάσεις τύπου σωματιδίου) και σε υψηλότερες (καταστάσεις τύπου κοιλότητας) συχνότητες [162, 163]. Επιπλέον, οι συχνότητες των υβριδικών αυτών καταστάσεων μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση, μεταβάλλοντας το πάχος του μεταλλικού φλοιού ή/και το διηλεκτρικό υλικό του πυρήνα [164].

Χάρη κυρίως στην εύκολη ρύθμιση της συχνότητας των πλασμονικών καταστάσεων, οι μεταλλικοί νανοφλοιοί έχουν βρεθεί στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος κατά την τελευταία δεκαετία και έχουν προταθεί αρκετές μέθοδοι για την παρασκευή τους [164–168]. Μεμονωμένοι νανοφλοιοί, αλλά και μικρές συγκεντρώσεις τέτοιων σωματιδίων, έχουν αξιοποιηθεί σε ποικίλες εφαρμογές, όπως συλλογή της ηλιακής ακτινοβολίας [169], ενίσχυση της εκπομπής laser [170], ενίσχυση του φθορισμού [171, 172], ως νανοκεραίες [173], σε ιατρικές εφαρμογές [174–176], ενώ ευθύγραμμες αλυσίδες μεταλλικών νανοφλοιών μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως κυματοδηγοί [177, 178]. Τα πράγματα γίνονται ακόμα πιο ενδιαφέροντα όταν αξιοποιηθεί η περιοδικότητα. 2Δ πλέγματα μεταλλικών νανοφλοιών έχουν παρασκευαστεί με διάφορες τεχνικές [179–181], και η οπτική τους απόκριση έχει μελετηθεί [182–185], εν όψει εντυπωσιακών εφαρμογών ως υποστρώματα για την επιφανειακή ενίσχυση της σκέδασης Raman [186–188] ή της χβαντικής συμβολής [189], ως νανοκεραίες [190], σε βιολογικές εφαρμογές ως ανοσοπροσδιορισμοί [191], ή ως συστήματα που εμφανίζουν ηλεκτρομαγνητικά επαγόμενη διαφάνεια [192]. Πρόσφατα εξάλλου έγιναν βήματα και προς την παρασκευή 3Δ κρυστάλλων μεταλλικών νανοφλοιών [193], συστημάτων που μπορούν να εμφανίσουν φωτονικά χάσματα [97, 194–196]. Τέλος, ετεροδομές αποτελούμενες από δύο ή περισσότερα είδη μεταλλικών νανοφλοιών παρουσιάζουν μεγάλο αριθμό φωτονικών καταστάσεων σε μικρή περιοχή συχνοτήτων, που προέρχονται από τις καταστάσεις των επί μέρους συστατικών της ετεροδομής

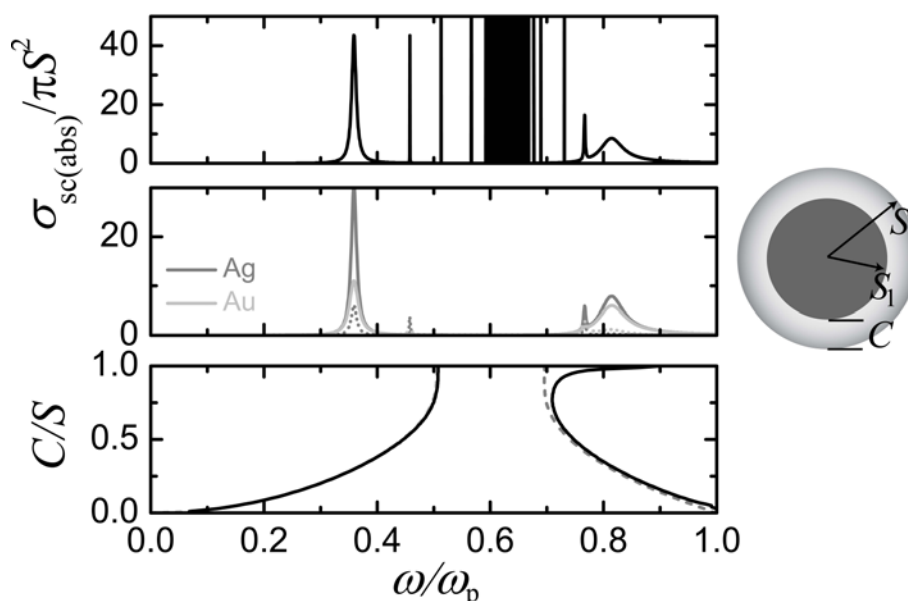
και μπορούν να αξιοποιηθούν, για παράδειγμα, ως δομές ευρυζωνικής απορρόφησης [97,98].

Παρά τα πλούσια και εύκολα ρυθμίσιμα στη συχνότητα οπτικά φάσματά τους, και το μεγάλο ενδιαφέρον που έχουν προσελκύσει, οι μεταλλικοί νανοφλοιοί δεν έχουν αξιοποιηθεί ιδιαίτερα στον σχεδιασμό οπτικών μεταλλικών, αν και η πιθανότητα αρνητικής διάθλασης σε 3Δ δομές τέτοιων σωματιδίων θα μπορούσε να έχει συναχθεί από σχετικά διαγράμματα ζωνών [196]. Μέχρι πρόσφατα, οι μόνες μελέτες σε αυτή την κατεύθυνση ήταν από τους Alù και Engheta, οι οποίοι μελέτησαν ένα σύνθετο μεταλλοδιηλεκτρικό σφαιρικό σωματίδιο για εφαρμογές οπτικής απόκρυψης [197], και από τους Γιαννόπαπα και Vitanon, που έδειξαν ότι ένα επίπεδο τέτοιων μεταλλικών νανοφλοιών με μια προσροφημένη ατέλεια μπορεί να οδηγήσει σε εστίαση του φωτός με διακριτική ικανότητα μικρότερη από το μήκος κύματος [198]. Στο παρόν κεφάλαιο μελετάμε την οπτική απόκριση 2Δ και 3Δ περιοδικών δομών μεταλλικών νανοφλοιών. Ξεκινάμε εξετάζοντας την οπτική απόκριση μεμονωμένων νανοφλοιών, καθώς και την ενίσχυση φθορισμού που αυτοί μπορούν να προσφέρουν. Στη συνέχεια αναλύουμε διαγράμματα διέλευσης/απορρόφησης 2Δ πλεγμάτων, και τη φωτονική δομή ζωνών ενός 3Δ κρυστάλλου, με βάση τη θεωρία ομάδων [97]. Ακολούθως διερευνούμε τη δυνατότητα εξομείωσης τέτοιων δομών με ομοιογενές (ισοτροπικό ή ανισοτροπικό) μέσο, τόσο με τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης [147] όσο και με τη μέθοδο του άπειρου κρυστάλλου [40], αλλά και το ενδεχόμενο εμφάνισης αρνητικής διάθλασης [102]. Τέλος, δείχνουμε, για πρώτη φορά, ότι είναι δυνατή η εμφάνιση επιφανειακών φωτονικών καταστάσεων, και μάλιστα με σημαντικό μήκος διάδοσης, σε 3Δ φωτονικούς κρυστάλλους μεταλλικών νανοφλοιών [99].

4.1 Σκέδαση από μεμονωμένο νανοφλοιό

Στο παρόν εδάφιο θα εξετάσουμε την οπτική απόκριση μεμονωμένων μεταλλικών νανοφλοιών, αποτελούμενων από έναν πυρήνα SiO_2 , ακτίνας S_1 και διηλεκτρικής συνάρτησης $\epsilon_1 = 2.13$ ($\mu_1 = 1$), καλυμμένο από έναν μεταλλικό φλοιό πάχους C , η διηλεκτρική συνάρτηση του οποίου, ϵ_2 , θεωρούμε ότι περιγράφεται από το μοντέλο Drude [Εξ. (3.1), βλ. και Παράρτημα Δ], και $\mu_2 = 1$. Τότε συνολική ακτίνα του σωματιδίου, το οποίο θεωρούμε ότι βρίσκεται στον αέρα ($\epsilon = \mu = 1$), είναι $S = S_1 + C$, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 4.1.

Όταν ΗΜ ακτινοβολία προσπίπτει σε έναν μεταλλικό νανοφλοιό, διεγείρονται ταυτόχρονα πλασματικές καταστάσεις σωματιδίου και κοιλότητας, εντοπισμένες στην εξωτερική και την εσωτερική επιφάνεια του μεταλλικού φλοιού, αντίστοιχα, οι οποίες εκδηλώνονται ως κορυφές συντονισμού στην ενεργό διατομή σκέδασης του σωματιδίου. Αυτό φαίνεται στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 4.1, όπου έχουμε αγνοήσει τις απώλειες λόγω απορρόφησης θέτοντας $\tau^{-1} = 0$ στην Εξ. (3.1), για έναν νανοφλοιό με ακτίνα $S = c/\omega_p$ και πάχος $C = 0.3c/\omega_p$. Οι καταστάσεις αυτές αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, σε μια εικόνα ανάλογη της γνωστής από τη μοριακή φυσική δημιουργίας υβριδικών τροχιακών, οδηγώντας σε υβριδικές πλασματικές καταστάσεις, ηλεκτρικού 2^ℓ -πολικού τύπου, σε χαμηλότερες (καταστάσεις τύπου σωματιδίου) και υψηλότερες (καταστάσεις τύπου κοιλότητας) συχνότητες [162,163]. Αυξάνοντας την πολυπολική τάξη, ℓ , οι ιδιοσυχνότητες των πλασματικών καταστάσεων τύπου σωματιδίου και τύπου κοιλότητας πλησιάζουν μεταξύ τους, οδηγώντας σε ένα πυκνό, σχεδόν συνεχές φάσμα. Αν βέβαια λάβουμε υπόψη την απορρόφηση στο μεταλλικό υλικό, θέτοντας $\tau^{-1} \neq 0$ στην Εξ. (3.1), μόνο οι διπολικές και τετραπολικές καταστάσεις, που έχουν μικρότερους χρόνους ζωής, επιζούν στην ενεργό διατομή σκέδασης (και εκδηλώνονται και ως κορυφές συντονισμού στην



Σχήμα 4.1: Σχηματική αναπαράσταση ενός μεταλλικού νανοφλοιού ακτίνας S , αποτελούμενου από έναν πυρήνα SiO_2 ακτίνας S_1 και έναν μεταλλικό φλοιό πάχους C , στον αέρα. Πάνω διάγραμμα: Ενεργός διατομή σκέδασης (κανονικοποιημένη στη γεωμετρική διατομή) για έναν μεταλλικό φλοιό με $S_1 = 0.7c/\omega_p$ και $C = 0.3c/\omega_p$, έχοντας αγνοήσει τις απώλειες λόγω απορρόφησης θέτοντας $\tau^{-1} = 0$ στην Εξ. (3.1). Μεσαίο διάγραμμα: Ενεργός διατομή σκέδασης (συνεχείς γραμμές) και απορρόφησης (εστιγμένες γραμμές) (κανονικοποιημένες στη γεωμετρική διατομή) για τον ίδιο μεταλλικό νανοφλοιό, λαμβάνοντας υπόψη την απορρόφηση θέτοντας στην Εξ. (3.1) $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$ και $\tau^{-1} = 0.01\omega_p$, τιμές κατάλληλες για τον άργυρο και τον χρυσό, αντίστοιχα. Κάτω διάγραμμα: Μεταβολή της θέσης των διπολικών πλάσμονικών συντονισμών με το πάχος του φλοιού, παίρνοντας υπόψη (μαύρες συνεχείς γραμμές) ή αγνοώντας (γκρι διακεκομμένες γραμμές) την επίδραση των μη τοπικών φαινομένων, για σταθερή ακτίνα του σωματιδίου, $S = c/\omega_p$.

ενεργό διατομή απορρόφησης). Οι ανώτερες πολυπολικές καταστάσεις έχουν χρόνους ζωής μεγαλύτερους από τον χρόνο αποκατάστασης των ελεύθερων ηλεκτρονίων και προλαβαίνουν να απορροφηθούν πλήρως. Αυτό φαίνεται καθαρά στο μεσαίο διάγραμμα του Σχ. 4.1, όπου δείχνουμε τις ενεργές διατομές σκέδασης και απορρόφησης για δύο τιμές του τ^{-1} , $0.002\omega_p$ και $0.01\omega_p$, τιμές κατάλληλες για τον άργυρο (Ag) και τον χρυσό (Au), αντίστοιχα, όπως προκύπτει από προσαρμογή της Εξ. (3.1) σε σχετικά πειραματικά δεδομένα [199].

Η αλληλεπίδραση μεταξύ των πλάσμονικών καταστάσεων τύπου σωματιδίου και τύπου κοιλότητας, και οι συνεπαγόμενες μετατοπίσεις των υβριδικών καταστάσεων στη συχνότητα, είναι ισχυρότερες όσο πιο λεπτός είναι ο μεταλλικός φλοιός, λόγω της μεγαλύτερης επικάλυψης των πεδίων, και είναι πιο έντονες για τις διπολικές καταστάσεις λόγω της μεγαλύτερης χωρικής έκτασης των πεδίων. Η αλληλεπίδραση των διπολικών πλάσμονικών καταστάσεων παρουσιάζεται στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 4.1. Απουσία αλληλεπίδρασης μεταξύ των θεμε-

λιωδών πλασμονικών καταστάσεων, δηλαδή για πολύ μικρή ακτίνα του διηλεκτρικού πυρήνα, η διπολική πλασμονική κατάσταση τύπου σωματιδίου βρίσκεται σε συχνότητα $0.508\omega_p$ (τη συχνότητα διπολικού πλασμονικού συντονισμού μιας ομοιογενούς μεταλλικής σφαίρας ακτίνας c/ω_p) και η διπολική πλασμονική κατάσταση τύπου κοιλότητας σε συχνότητα $0.696\omega_p$ (τη συχνότητα διπολικού συντονισμού μιας μικρής σφαιρικής κοιλότητας SiO_2 ακτίνας c/ω_p σε μέταλλο). Καθώς το πάχος του φλοιού μειώνεται, οι δύο καταστάσεις σταδιακά απωθούνται. Οι ιδιοσυχνότητες αυτές μπορούν να υπολογιστούν αναλυτικά από τη θέση των πόλων του πίνακα σκέδασης σε κάθε περίπτωση. Έτσι, για μια μικρή μεταλλική σφαίρα σε περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε έχουμε [2]

$$\omega_\ell = \omega_p \sqrt{\frac{\ell}{\ell + (\ell + 1)\varepsilon}}, \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

ενώ για μια μικρή κοιλότητα σε μέταλλο παίρνουμε [200]

$$\bar{\omega}_\ell = \omega_p \sqrt{\frac{\ell + 1}{(\varepsilon_1 + 1)\ell + 1}}. \quad (4.2)$$

Στην περίπτωση πολύ λεπτών μεταλλικών φλοιών η μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων είναι πολύ μικρότερη από ό,τι στο μέταλλο. Αυτό μπορεί να ληφθεί υπόψη προσθέτοντας στη διηλεκτρική συνάρτηση Drude έναν επιπλέον όρο απορρόφησης [201],

$$\tau_S^{-1} = \tau^{-1} + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{v_F}{C}, \quad (4.3)$$

όπου v_F είναι η ταχύτητα Fermi του μετάλλου· για τον χρυσό $v_F = 0.00467c$ [126]. Από την άλλη, και τα μη τοπικά φαινόμενα, που σχετίζονται με τη διέγερση διαμήκων κυμάτων στον νανοφλοιό και μια διηλεκτρική συνάρτηση που εξαρτάται από το κυματόνισμα, μπορεί να είναι επίσης σημαντικά. Ο πιο εύκολος τρόπος να ληφθούν υπόψη είναι στα πλαίσια του απλού αλλά αποτελεσματικού υδροδυναμικού μοντέλου, σύμφωνα με το οποίο η διαμήκης διηλεκτρική συνάρτηση δίνεται από τη σχέση (βλ. Παράρτημα Δ')

$$\varepsilon_L(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \frac{3}{5}v_F^2 q^2 + i\omega\tau^{-1}}, \quad (4.4)$$

ενώ η εγκάρσια διηλεκτρική συνάρτηση διατηρεί την απλή τοπική μορφή της, Εξ. (3.1) [83,202]. Η σχέση διασποράς για τα διαμήκη κύματα πλάσματος προκύπτει από την απαίτηση $\varepsilon_L(q_L, \omega) = 0$, σύμφωνα με τις εξισώσεις του Maxwell, ενώ ο πίνακας σκέδασης του μεταλλικού νανοφλοιού υπολογίζεται όπως περιγράψαμε στο Εδ. 2.1.

Όπως φαίνεται με συνεχείς γραμμές στο Σχ. 4.1, τα μη τοπικά φαινόμενα οδηγούν σε μετατόπιση των διπολικών πλασμονικών συντονισμών τύπου κοιλότητας προς μεγαλύτερες συχνότητες, σε συμφωνία με ημιστατικούς υπολογισμούς [203], ενώ οι αντίστοιχοι πλασμονικοί συντονισμοί τύπου σωματιδίου μένουν πρακτικά ανεπηρέαστοι. Αυτό εξηγείται ως εξής: Στην περιοχή κάτω από τη συχνότητα πλάσματος το διάμηκες πεδίο εισχωρεί στον νανοφλοιό μόνο με τη μορφή φθίνοντων κυμάτων, με μήκος διάδοσης ανάλογο του $\text{Im}q_L$, που μειώνεται

όσο προχωράμε προς χαμηλότερες συχνότητες. Ωστόσο, αυτό το φθίνον πεδίο τροποποιεί το πεδίο στο εσωτερικό του νανοφλοιού, προκαλώντας τη μικρή μετατόπιση στη συχνότητα συντονισμού. Στην περιοχή των χαμηλών συχνοτήτων των διπολικών συντονισμών τύπου σωματιδίου η διεξόδωση του διαμήκους πεδίου είναι προφανώς πολύ μικρή σε σύγκριση με τη χωρική έκταση αυτών των καταστάσεων συντονισμού, και η αλληλεπίδρασή τους πρακτικά αμελητέα. Αντίθετα, στην περιοχή των πλασμονικών καταστάσεων τύπου κοιλότητας η αλληλεπικάλυψη με το διάμηκες πεδίο είναι πολύ μεγαλύτερη, μια και το πεδίο αυτό έχει μεγαλύτερο μήκος διάδοσης σε υψηλότερες συχνότητες. Επιπλέον, καθώς το πάχος του φλοιού αυξάνεται, ο εντοπισμός των καταστάσεων τύπου κοιλότητας στην εσωτερική επιφάνεια του νανοφλοιού γίνεται εντονότερος, και κατά συνέπεια η αλληλεπίδρασή τους με το διάμηκες πεδίο γίνεται ακόμη ισχυρότερη.

4.2 Ενίσχυση εκπομπής φθορισμού κοντά σε μεταλλικό νανοφλοιό

Είναι γνωστό ότι η αυθόρμητη εκπομπή ενός διεγερμένου ενεργού κέντρου, που μπορεί να είναι για παράδειγμα ένα άτομο, μόριο, ή κβαντική κουκκίδα, εξαρτάται όχι μόνο από τα εγγενή χαρακτηριστικά του ενεργού κέντρου αλλά και από το περιβάλλον, διότι αυτό μπορεί να τροποποιήσει σημαντικά τις καταστάσεις του ΗΜ πεδίου που καθορίζουν τη μετάβαση του ενεργού κέντρου στη θεμελιώδη κατάσταση. Ήδη από το 1946 ο Purcell έδειξε ότι ο ρυθμός αυθόρμητης αποδιέγερσης που σχετίζεται με τις μεταπτώσεις της μαγνητικής ροπής πυρήνων στην περιοχή των ραδιοσυχνοτήτων μπορεί να αυξηθεί κατά πολλές τάξεις μεγέθους αν το σύστημα συζευχθεί με κατάλληλο ΗΜ αντηχείο [204]. Αργότερα, μια σειρά πρωτοποριακών πειραμάτων μέτρησης του χρόνου ζωής διεγερμένων μορίων κοντά σε επίπεδες επιφάνειες ευγενών μετάλλων έδειξε ότι σε μεγάλες αποστάσεις από την επιφάνεια ο χρόνος ζωής μεταβάλλεται περιοδικά λόγω φαινομένων συμβολής, ενώ τείνει μονότονα στο μηδέν καθώς το μόριο πλησιάζει στην επιφάνεια επειδή η ενέργεια μεταφέρεται στο μέταλλο χωρίς να ακτινοβολείται στο περιβάλλον [205–207]. Ο ρυθμός αυτής της μεταφοράς ενέργειας παρουσιάζει μέγιστο στην ιδιοσυχνότητα των επιφανειακών πλασμονίων του μετάλλου, τα οποία αλληλεπιδρούν με το κοντινό πεδίο του εκπομπού και προκαλούν ισχυρή μεταφορά ενέργειας στο μέταλλο [208]. Εκτενείς μελέτες έδειξαν ότι επιφάνειες που υποστηρίζουν εντοπισμένες και διαδιδόμενες πλασμονικές καταστάσεις, όπως επίπεδες, τραχείες, και περιοδικά διαμορφωμένες μεταλλικές επιφάνειες, αποτελούν κατάλληλα υποστρώματα για την ενίσχυση του φθορισμού. Εξάλλου, η εντυπωσιακή πρόοδος που έχει σημειωθεί τα τελευταία χρόνια στην κατά βούληση διαμόρφωση επιφανειών σε νανοσκοπική κλίμακα διευρύνει σημαντικά τις δυνατότητες ενίσχυσης του φθορισμού [209].

Η επίδραση των σωματιδιακών πλασμονίων στον ρυθμό αποδιέγερσης μορίων κοντά σε μεταλλικό νανოსωματίδιο έχει μελετηθεί θεωρητικά [109,210]. Ωστόσο, οι σύγχρονες εξελίξεις σε τεχνικές οπτικής κοντινού πεδίου κατέστησαν δυνατή τη διενέργεια πειραμάτων, με διακριτική ικανότητα στην κλίμακα του νανομέτρου, σε μεμονωμένα μόρια που αλληλεπιδρούν με καλώς χαρακτηρισμένα αντικείμενα νανοσκοπικών διαστάσεων [211,212] και προκάλεσαν περαιτέρω λεπτομερείς θεωρητικές μελέτες μεμονωμένων στοιχειωδών εκπομπών κοντά σε νανოსωματίδια ή ακίδες [213–215]. Όσον αφορά τη διαδικασία του φθορισμού, έχει γίνει πλέον κατανοητό ότι τα σωματιδιακά πλασμόνια προκαλούν σημαντική ενίσχυση του διεγείροντος τοπικού πεδίου και δραστική αλλαγή του ρυθμού εκπομπής ακτινοβολίας. Ταυτόχρονα, η

θέρμανση Joule του μεταλλικού υλικού εισάγει έναν επιπλέον δίαυλο διαρροής ενέργειας· ο ανταγωνισμός αυτών των μηχανισμών προσδιορίζει αν έχουμε τελικά αύξηση ή μείωση του φθορισμού σε διάφορες θέσεις του φθορίζοντος μορίου [211]. Επομένως, μεταλλικά νανοσωματίδια με πλασμονικούς συντονισμούς που μπορούν να ρυθμιστούν εντός μιας ευρείας περιοχής συχνοτήτων, όπως είναι οι μεταλλικοί νανοφλοιοί, προσφέρουν εντυπωσιακές προοπτικές για έλεγχο της εκπομπής φθορισμού από ενεργά κέντρα όπως άτομα [216], (βιο)μόρια [217], ή κβαντικές κουκκίδες [218,219]. Πρόσφατα πειράματα για έναν εκπομπό χαμηλής κβαντικής απόδοσης κοντά σε μεταλλικό νανοφλοιό έδειξαν ότι η ενίσχυση του φθορισμού βελτιώνεται όσο αυξάνεται η ικανότητα σκέδασης του σωματιδίου ενώ ταυτόχρονα ρυθμίζεται ο πλασμονικός συντονισμός προς το μήκος κύματος εκπομπής του φθορίζοντος κέντρου [220]. Από την άλλη, ο ρυθμός αποδιέγερσης ενός εκπομπού σε διάφορες θέσεις μέσα και έξω από έναν μεταλλικό νανοφλοιό έχει επίσης μελετηθεί, αλλά μόνο για ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος [106]. Στο παρόν εδάφιο αναπτύσσουμε μια συστηματική μέθοδο υπολογισμού των ρυθμών διέγερσης και αποδιέγερσης ενός εκπομπού κοντά σε μεταλλικό σωματίδιο μέσω ηλεκτροδυναμικών υπολογισμών ακριβείας.

Στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος (το μήκος κύματος της ορατής και υπέρυθρης ακτινοβολίας είναι περίπου τρεις τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από τις διαστάσεις του εκπομπού) η αλληλεπίδραση του εκπομπού με το εξωτερικό πεδίο περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή $\hat{H}_{int} = -\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{E}}$, δηλαδή από έναν όρο σύζευξης της ηλεκτρικής διπολικής ροπής του εκπομπού με το εξωτερικό πεδίο. Σύμφωνα με τον χρυσό κανόνα του Fermi ο ρυθμός διέγερσης είναι ανάλογος του τετραγώνου του μέτρου του στοιχείου πίνακα της \hat{H}_{int} μεταξύ της αρχικής και τελικής κατάστασης. Σε ένα ομοιογενές περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ και μαγνητικής διαπερατότητας μ , χωρίς σκεδαστές, ο εκπομπός διεγείρεται από το προσπίπτον πεδίο \mathbf{E}_{in} . Όταν στο περιβάλλον υπάρχει ένα σωματίδιο, το συνολικό πεδίο που διεγείρει τον εκπομπό, \mathbf{E}_t , είναι το άθροισμα του εξωτερικά προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου από το σωματίδιο πεδίου. Υποθέτουμε ότι ο σκεδαστής επιδρά στο τοπικό διεγείρον πεδίο και στην εκπεμπόμενη ακτινοβολία αλλά όχι στις μεταβάσεις του εκπομπού, τον οποίο αντιμετωπίζουμε ως ένα κλασικό ηλεκτρικό δίπολο στη θέση \mathbf{r}_d με διπολική ροπή \mathbf{p} παράλληλη στο \mathbf{E}_{in} . Κάτω από το κατώφλι κορεσμού ο ρυθμός διέγερσης ενισχύεται λόγω της παρουσίας του σκεδαστή κατά έναν παράγοντα

$$\eta_{exc} = \frac{|\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_t(\mathbf{r}_d)|^2}{|\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_{in}(\mathbf{r}_d)|^2}. \quad (4.5)$$

Το συνολικό πεδίο που είναι υπεύθυνο για τη διέγερση του εκπομπού αποτελείται από το εξωτερικά προσπίπτον πεδίο συν το σκεδαζόμενο από το σωματίδιο. Για σφαιρικά σωματίδια, ακτίνας S , το προσπίπτον και το σκεδαζόμενο πεδίο δίνονται από τις Εξ. (2.4) και (2.5), αντίστοιχα. Στην ειδική περίπτωση που θα εξετάσουμε, όπου το δίπολο βρίσκεται σε θέση $\mathbf{r}_d = r_d \hat{\mathbf{z}}$ από το κέντρο σφαιρικού σκεδαστή και τόσο η διπολική ροπή του διπόλου όσο και το προσπίπτον ηλεκτρικό πεδίο είναι επίσης προσανατολισμένα κατά τη διεύθυνση z (βλ. Σχ. 4.2), είναι εύκολο να δείξουμε, χρησιμοποιώντας σχέσεις των Παραρτημάτων Β' και Γ', ότι ο ρυθμός διέγερσης του διπόλου γράφεται

$$\eta_{exc} = \pi \sum_{\ell=1}^{+\infty} \left\{ \frac{i^{\ell+1}}{q_{exc} r_d} \sqrt{\ell(\ell+1)(2\ell+1)} [j_{\ell}(q_{exc} r_d) + T_{E\ell} h_{\ell}^+(q_{exc} r_d)] \right\}$$

$$\times \left[Y_{\ell-1}\left(\frac{\pi}{2}, 0\right) - Y_{\ell 1}\left(\frac{\pi}{2}, 0\right) \right] \Bigg\}^2, \quad (4.6)$$

όπου $q_{\text{exc}} = \omega_{\text{exc}} \sqrt{\varepsilon \mu} / c$ ο κυματάριθμος στη συχνότητα διέγερσης, ω_{exc} , και $T_{\ell\ell}$ το ηλεκτρικό κομμάτι του πίνακα σκέδασης του σφαιρικού σωματιδίου, Εξ. (2.11) ή (2.19) για ομοιογενή ή πολυστρωματική σφαίρα, αντίστοιχα.

Για την περιγραφή της διαδικασίας αυθόρμητης αποδιέγερσης θεωρούμε και πάλι τον εκπομπό ως ένα σημειακό δίπολο, το οποίο τώρα συνιστά μια πηγή ΗΜ ακτινοβολίας. Ένα ηλεκτρικό δίπολο \mathbf{p} στη θέση \mathbf{r}_d , σε ομοιογενές περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ε και μαγνητικής διαπερατότητας μ , που ταλαντώνεται με συχνότητα ω (εν γένει διαφορετική από τη συχνότητα διέγερσης), επάγει μια εξωτερική πόλωση $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{p} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_d) \exp(-i\omega t)]$. Το ΗΜ πεδίο του ταλαντούμενου διπόλου έχει την ίδια συχνότητα, ω , και το χωρικό του κομμάτι δίνεται από τις εξισώσεις του Maxwell, Εξ. (1.14), όπως διαμορφώνονται παρουσία της πηγής,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_d(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\omega \mu \mu_0} \nabla \times \mathbf{E}_d(\mathbf{r}) \\ \frac{c^2}{\varepsilon \mu} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_d(\mathbf{r}) &= \omega^2 \mathbf{E}_d(\mathbf{r}) + \frac{\omega^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \mathbf{p} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_d). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Η δεύτερη των (4.7) επιλύεται μέσω της συνάρτησης Green, $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [Εξ. (ε'.47)]$

$$\mathbf{E}_d(\mathbf{r}) = -\frac{\omega^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_d) \mathbf{p}. \quad (4.8)$$

Σημειώνουμε ότι στην περίπτωση μας μπορούμε να αγνοήσουμε τον όρο $\widehat{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') / \omega^2$ στην έκφραση της συνάρτησης Green, Εξ. (ε'.47). Τότε το ηλεκτρικό πεδίο του διπόλου μπορεί να γραφεί σε μορφή σφαιρικών κυμάτων με συντελεστές $d_{P\ell m}^0 = iq^3 \overline{\mathbf{H}}_{P\ell m}(\mathbf{r}_d) \cdot \mathbf{p} / \varepsilon \varepsilon_0$, για $r < r_d$, και σε μορφή σφαιρικών κυμάτων με συντελεστές $d_{P\ell m}^+ = iq^3 \overline{\mathbf{J}}_{P\ell m}(\mathbf{r}_d) \cdot \mathbf{p} / \varepsilon \varepsilon_0$, για $r > r_d$. Η σκέδαση από το σωματίδιο παράγει ένα δευτερεύον κύμα, οπότε το συνολικό πεδίο, \mathbf{E}_t , αποτελείται από το πεδίο του διπόλου συν το σκεδαζόμενο από το σωματίδιο, που δίνεται από την Εξ. (2.5).

Ο ρυθμός με τον οποίο το ταλαντούμενο δίπολο χάνει ενέργεια μπορεί να υπολογιστεί από τη ροή ενέργειας που ακτινοβολείται από το σύστημα διπόλου-σκεδαστή στο περιβάλλον και τη ροή ενέργειας που απορροφάται από τον σκεδαστή. Ο ρυθμός αποδιέγερσης μέσω ακτινοβολίας, Γ_r , προκύπτει υπολογίζοντας το διάνυσμα Poynting και ολοκληρώνοντας τη ροή ενέργειας από την επιφάνεια μιας μεγάλης σφαίρας που περικλείει το δίπολο και τον σκεδαστή. Στην περιοχή αυτή το συνολικό πεδίο, \mathbf{E}_t , έχει τη μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων με συντελεστές $a_{P\ell m}^+$, που δίνονται από την Εξ. (2.10), λαμβάνοντας βέβαια υπόψη ότι το προσπίπτον στον σκεδαστή πεδίο είναι το εκπεμπόμενο από το δίπολο. Τότε η ακτινοβολούμενη ισχύς προκύπτει

$$P_r = \frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\mu \mu_0}} \sum_{P\ell m} |a_{P\ell m}^+|^2, \quad (4.9)$$

και $\Gamma_r = P_r/\hbar\omega$. Απουσία σχεδαστών, η ισχύς που ακτινοβολείται από το δίπολο προκύπτει από την Εξ. (4.9) θέτοντας $a_{P\ell m}^+ = d_{P\ell m}^+$. Τότε

$$P_{0r} = \frac{cq^4 p^2}{12\pi\epsilon\epsilon_0\sqrt{\epsilon\mu}}. \quad (4.10)$$

Στην ειδική περίπτωση που εξετάζουμε ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{p} \parallel \mathbf{r}_d \parallel \hat{\mathbf{z}}$), προκύπτει

$$\frac{P_r}{P_{0r}} = \frac{3}{2} \frac{1}{q^2 r_d^2} \sum_{\ell=1}^{+\infty} \ell(\ell+1)(2\ell+1) |j_\ell(qr_d) + T_{E\ell} h_\ell^+(qr_d)|^2. \quad (4.11)$$

Όμοια, ο ρυθμός αποδιέγερσης μέσω διαδικασιών που σχετίζονται με τις απώλειες στον σχεδαστή, $\Gamma_{\text{abs}} = P_{\text{abs}}/\hbar\omega$, προκύπτει από τη ροή εισερχόμενης ενέργειας στην επιφάνεια του σχεδαστή. Ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting σε μια επιφάνεια που περικλείει τον σχεδαστή, αλλά όχι το δίπολο, παίρνουμε

$$P_{\text{abs}} = -\frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_{P\ell m} \left\{ |T_{P\ell}|^2 + \text{Re} [T_{P\ell} d_{P\ell m}^{0*}] \right\}, \quad (4.12)$$

η οποία, στην περίπτωσή μας, απλοποιείται στην

$$\frac{P_{\text{abs}}}{P_{0r}} = -\frac{3}{2} \frac{1}{q^2 r_d^2} \text{Re} \sum_{\ell=1}^{+\infty} \ell(\ell+1)(2\ell+1) \left[T_{E\ell} + |T_{E\ell}|^2 \right] h_\ell^+(qr_d). \quad (4.13)$$

Από την άλλη, η συνολική ισχύς που εκπέμπει το δίπολο υπολογίζεται ως η ροή ενέργειας από μια επιφάνεια που περικλείει το δίπολο αλλά όχι τον σχεδαστή. Είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι αυτή ισούται με το άθροισμα της ακτινοβολούμενης και απορροφούμενης ισχύος που υπολογίστηκαν παραπάνω.

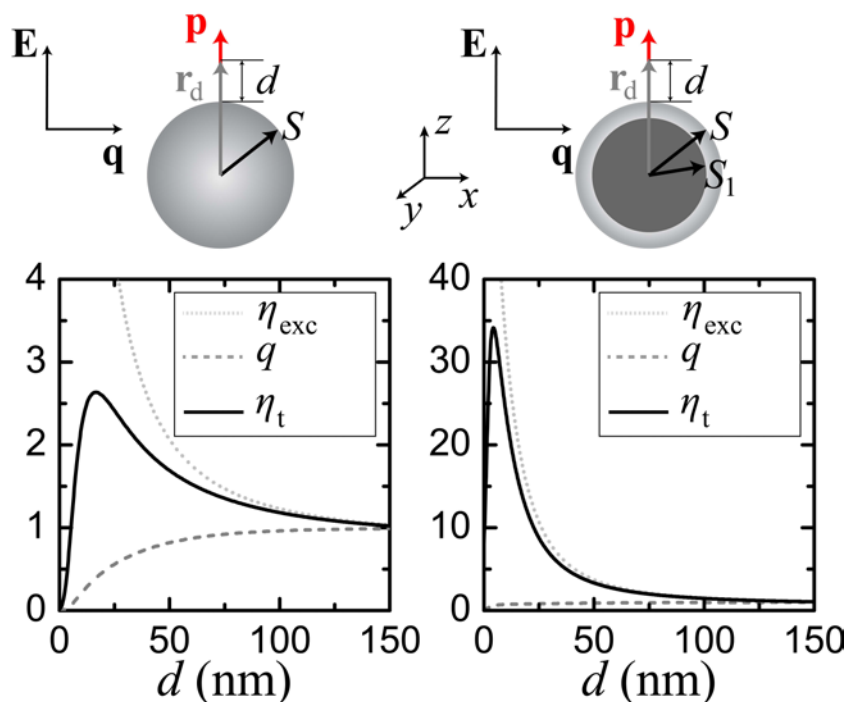
Ο συνολικός ρυθμός αποδιέγερσης του εκπομπού, απουσία σχεδαστή, είναι το άθροισμα των ρυθμών απωλειών λόγω ακτινοβολίας και λόγω άλλων αιτιών, Γ_{0r} και Γ_{0nr} , αντίστοιχα. Ο ρυθμός Γ_{0nr} αναφέρεται στους ενδογενείς μηχανισμούς απωλειών του εκπομπού, που μπορεί να είναι διαδικασίες πολλών φωτονίων, διαδικασίες άμεσης μεταφοράς ηλεκτρονίων, κλπ, και δεν εξαρτάται από το περιβάλλον. Η εσωτερική χβαντική απόδοση των εκπομπών ορίζεται ως $q_0 = \Gamma_{0r}/(\Gamma_{0r} + \Gamma_{0nr})$. Θεωρώντας ότι η παρουσία του σχεδαστή εισάγει έναν πρόσθετο μηχανισμό αποδιέγερσης, μέσω απορρόφησης, η χβαντική απόδοση γίνεται $q = \Gamma_{0r}/(\Gamma_{0r} + \Gamma_{0\text{abs}} + \Gamma_{0nr})$. Αξιοποιώντας τον ορισμό του q_0 παίρνουμε

$$q = \frac{\Gamma_r/\Gamma_{0r}}{\Gamma_r/\Gamma_{0r} + \Gamma_{\text{abs}}/\Gamma_{0r} + (q_0^{-1} - 1)} = \frac{P_r/P_{0r}}{P_r/P_{0r} + P_{\text{abs}}/P_{0r} + (q_0^{-1} - 1)}, \quad (4.14)$$

Τα P_r/P_{0r} και P_{abs}/P_{0r} έχουν υπολογιστεί από τις Εξ. (4.9), (4.10) και (4.12) [ή τις (4.11) και (4.13)], ενώ το q_0 είναι χαρακτηριστικό για κάθε εκπομπό. Δεδομένου ότι οι διαδικασίες διέγερσης και αποδιέγερσης δεν επηρεάζουν η μία την άλλη, μπορούμε να τις αντιμετωπίσουμε ανεξάρτητα. Τότε ο συνολικός ρυθμός ενίσχυσης (ή μείωσης) του φθορισμού δίνεται από τη σχέση

$$\eta_t = \eta_{\text{exc}} \frac{q}{q_0}. \quad (4.15)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι οι ρυθμοί αποδιέγερσης είναι πολύ μεγαλύτεροι για προσανατολισμό του διπόλου στην ακτινική διεύθυνση (όπως στο παράδειγμα που εξετάζουμε) από ό,τι στην εφαπτομενική. Αυτό οφείλεται στο ότι το κοντινό πεδίο ενός διπόλου σε μια δεδομένη απόσταση είναι δύο φορές ισχυρότερο κατά μήκος της διπολικής ροπής από ό,τι κάθετα σε αυτήν.



Σχήμα 4.2: Ρυθμός διέγερσης (ανοιχτές γκρι εστιγμένες γραμμές), χβαντική απόδοση (γκρι διακεκομμένες γραμμές) και φθορισμός (μαύρες συνεχείς γραμμές) συναρτήσει της απόστασης του εκπομπού από ομοιογενή σφαίρα χρυσού ακτίνας 40nm (αριστερά) και από μεταλλικό νανοφλοιό της ίδιας ακτίνας, με πυρήνα SiO₂ ακτίνας 32.7nm και περίβλημα αργύρου πάχους 7.3nm (δεξιά).

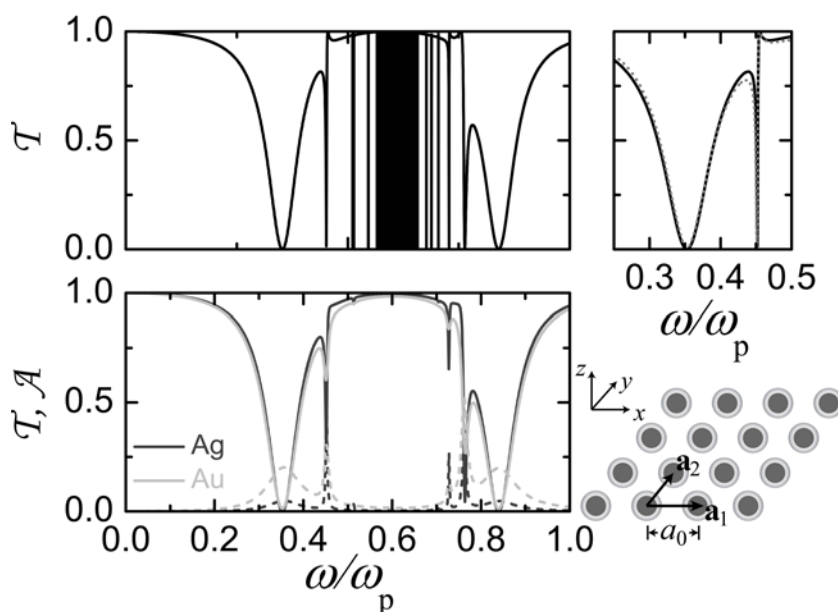
Στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 4.2 παρουσιάζουμε τον ρυθμό διέγερσης, τη χβαντική απόδοση και τον φθορισμό συναρτήσει της απόστασης ενός διπόλου από μια σφαίρα χρυσού, ακτίνας 40nm, στον αέρα. Το δίπολο διεγείρεται σε μήκος κύματος $\lambda_{\text{exc}} = 532\text{nm}$ και εκπέμπει σε μήκος κύματος $\lambda_{\text{exc}} = 560\text{nm}$, τιμές που χαρακτηρίζουν το μόριο της ροδαμίνης 6G. Για τη διηλεκτρική συνάρτηση του χρυσού χρησιμοποιούμε τις πειραματικές τιμές των Johnson και Christy [199]. Η ακτίνα της σφαίρας έχει επιλεγεί ώστε ο διπολικός πλασμαονικός συντονισμός της να βρίσκεται κοντά, αλλά όχι ακριβώς στα μήκη κύματος διέγερσης και αποδιέγερσης (516nm). Η θέση του διπόλου και ο προσανατολισμός τόσο του διπόλου όσο και του ηλεκτρικού πεδίου έχουν επιλεγεί ώστε να επιτυγχάνεται η μέγιστη ενίσχυση του φθορισμού, η οποία, θεωρώντας εσωτερική χβαντική απόδοση $q_0 = 1$, είναι περίπου ίση με 2.5 σε απόσταση 20nm από την επιφάνεια της σφαίρας, όπως φαίνεται στο σχήμα [214]. Όπως συζητήσαμε στο προηγούμενο εδάφιο, η απορρόφηση στον χρυσό είναι πολύ μεγαλύτερη από ό,τι στον άργυρο,

και άρα περιμένουμε να μπορεί να επιτευχθεί σημαντικότερη ενίσχυση του φθορισμού κοντά σε μια σφαίρα αργύρου. Όμως η διπολική πλασμονική κατάσταση μιας αντίστοιχης σφαίρας αργύρου βρίσκεται σε πολύ μικρότερο μήκος κύματος, $\sim 360\text{nm}$. Προκειμένου να τη φέρουμε στην περιοχή μηκών κύματος που μας ενδιαφέρει αξιοποιούμε τη δυνατότητα ρύθμισης της θέσης των συντονισμών που προσφέρουν οι μεταλλικοί νανοφλοιοί. Θεωρώντας έναν νανοφλοιό αργύρου, συνολικής ακτίνας 40nm , με πυρήνα SiO_2 ακτίνας 32.7nm , ο διπολικός πλασμονικός συντονισμός τύπου σωματιδίου βρίσκεται ακριβώς στα 516nm . Στο δεξιό διάγραμμα του Σχ. 4.2 παρατηρούμε ότι πράγματι, για ένα τέτοιο σωματίδιο η ενίσχυση του φθορισμού είναι περίπου μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη, και αυτό για μεγαλύτερο εύρος αποστάσεων του διπόλου από την επιφάνεια του νανοφλοιού.

4.3 Διδιάστατα πλέγματα νανοφλοιών

Θα θεωρήσουμε τώρα ένα τετραγωνικό πλέγμα, που ορίζεται από τα διανύσματα $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0, 0)$ και $\mathbf{a}_2 = a_0(0, 1, 0)$, με πλεγματική σταθερά $a_0 = 3c/\omega_p$, μεταλλικών νανοφλοιών με πυρήνα SiO_2 ακτίνας $S_1 = 0.7c/\omega_p$ και μεταλλικό περίβλημα πάχους $C = 0.3c/\omega_p$, στον αέρα, όπως σχηματικά φαίνεται στο Σχ. 4.3. Προς το παρόν θα δεχτούμε ότι δεν υπάρχουν απώλειες, θέτοντας $\tau^{-1} = 0$ στην Εξ. (3.1). Η διάταξη των νανοφλοιών σε επίπεδο έχει ως αποτέλεσμα την άρση του $(2\ell + 1)$ -πλου εκφυλισμού των καταστάσεων συντονισμού του μεμονωμένου νανοφλοιού, λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ τους. Για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$ οι καταστάσεις του συστήματος έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσμων αναπαραστάσεων της ομάδας D_{4h} : $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_{1'}, X_{2'}, X_{3'}, X_{4'}, X_{5'}$ [96,97]. Σύμφωνα με μια ανάλυση βασισμένη στη θεωρία ομάδων [114,221], μια διπολική κατάσταση ανάγεται σε μία κατάσταση συμμετρίας $X_{4'}$ και μία $X_{5'}$, ενώ μια τετραπολική σε μία X_1 , μία X_2 , μία X_3 και μία X_5 . Χρησιμοποιώντας τον προβολικό τελεστή βρίσκουμε ότι ένα επίπεδο κύμα που διαδίδεται κάθετα στο επίπεδο των νανοφλοιών ($\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$) δίνει μη μηδενική προβολή μόνο στις αναπαραστάσεις συμμετρίας X_5 και $X_{5'}$ και κατά συνέπεια μόνο καταστάσεις του επιπέδου με αυτές τις συμμετρίες μπορούν να διεγερθούν από ένα εξωτερικά προσπίπτον κύμα. Οι καταστάσεις διαφορετικής συμμετρίας είναι ανενεργές: πρόκειται για δέσμιες καταστάσεις του συστήματος που φθίνουν εκθετικά στο μηδέν καθώς απομακρυνόμαστε από το επίπεδο των νανοφλοιών. Αυτές οι ανενεργές καταστάσεις αντιστοιχούν σε πόλους του πίνακα σκέδασης \mathbf{S} στον πραγματικό άξονα συχνοτήτων. Αντίστοιχα, οι οπτικά ενεργές καταστάσεις συμμετρίας X_5 και $X_{5'}$ αντιστοιχούν σε πόλους στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο συχνοτήτων, με το φανταστικό μέρος του πόλου να προσδιορίζει το αντίστροφο του χρόνου ζωής της αντίστοιχης κατάστασης συντονισμού. Για παράδειγμα, η διπολική κατάσταση πλασμονίων τύπου σωματιδίου ενός μεμονωμένου νανοφλοιού δίνει μία δέσμια κατάσταση συμμετρίας $X_{4'}$ σε συχνότητα $0.409\omega_p$ και μία κατάσταση συντονισμού $X_{5'}$ σε συχνότητα $\omega_1 = 0.353\omega_p$ με αντίστροφο χρόνο ζωής $\gamma_1 = 0.043\omega_p$. Όμοια, η τετραπολική κατάσταση πλασμονίων τύπου σωματιδίου δίνει τρεις δέσμιες καταστάσεις σε συχνότητες $0.449\omega_p$ (X_2), $0.466\omega_p$ (X_1) και $0.469\omega_p$ (X_3), και μία κατάσταση συντονισμού X_5 στη συχνότητα $\omega_2 = 0.452\omega_p$ με αντίστροφο χρόνο ζωής $\gamma_2 = 0.0012\omega_p$. Αντίστοιχα, η διπολική κατάσταση πλασμονίων τύπου κοιλότητας ενός μεμονωμένου νανοφλοιού δίνει μία δέσμια κατάσταση συμμετρίας $X_{4'}$ σε συχνότητα $0.857\omega_p$ και μία κατάσταση συντονισμού $X_{5'}$ σε συχνότητα $\bar{\omega}_1 = 0.840\omega_p$ με αντίστροφο χρόνο ζωής $\bar{\gamma}_1 = 0.044\omega_p$. Όμοια, η τετραπολική κατάσταση πλασμονίων τύπου κοιλότητας δίνει τρεις δέσμιες καταστάσεις σε συχνότητες

$0.780\omega_p$ (X_3), $0.776\omega_p$ (X_1) και $0.761\omega_p$ (X_2), και μία κατάσταση συντονισμού X_5 στη συχνότητα $\bar{\omega}_2 = 0.764\omega_p$ με αντίστροφο χρόνο ζωής $\bar{\gamma}_2 = 0.040\omega_p$. Αυξάνοντας την πολυπολική τάξη, όπως και στην περίπτωση των μεμονωμένων νανοφλοιών, οι ιδιοσυχνότητες των πλασμονίων τύπου κοιλότητας και τύπου σωματιδίου πλησιάζουν η μία την άλλη, οδηγώντας σε ένα πυκνό, σχεδόν συνεχές φάσμα ιδιοκαταστάσεων [97].



Σχήμα 4.3: Πάνω: Συντελεστής διέλευσης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα τετραγωνικό πλέγμα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 3c/\omega_p$, από μεταλλικούς νανοφλοιούς με πυρήνα SiO_2 ακτίνας $S_1 = 0.7c/\omega_p$ και μεταλλικό περίβλημα πάχους $C = 0.3c/\omega_p$, στον αέρα, αγνοώντας την απορρόφηση. Μια πιο λεπτομερής εικόνα των δύο πρώτων συντονισμών παρουσιάζεται στο περιθώριο, μαζί με την καμπύλη προσαρμογής στην Εξ. (4.17) (γκρι εστιγμένη γραμμή). Κάτω: Συντελεστές διέλευσης (συνεχείς γραμμές) και απορρόφησης (διακεκομμένες γραμμές) για κάθετη πρόσπτωση στο ίδιο πλέγμα αν ληφθεί υπόψη η απορρόφηση από το μέταλλο θέτοντας στην Εξ. (3.1) $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$ (σκούρες γκρι γραμμές) και $\tau^{-1} = 0.01\omega_p$ (ανοιχτές γκρι γραμμές), τιμές κατάλληλες για τον άργυρο και τον χρυσό, αντίστοιχα.

Στο πάνω τμήμα του Σχ. 4.3 παρουσιάζουμε τον συντελεστή διέλευσης από ένα επίπεδο νανοφλοιών χωρίς απορρόφηση για κάθετη πρόσπτωση. Το φάσμα διέλευσης χαρακτηρίζεται από δομές συντονισμού διάφορων τύπων (συντονισμοί τύπου Fano), οι οποίοι προέρχονται από τις αντίστοιχες καταστάσεις συντονισμού των μεμονωμένων νανοφλοιών. Αποδεικνύεται [151] ότι οι δομές συντονισμού του συντελεστή διέλευσης κοντά στην περιοχή συχνοτήτων μιας ψευδοδέσμιας κατάστασης περιγράφονται ικανοποιητικά από τη σχέση

$$\mathcal{T} \approx \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(\omega - \omega_\nu)^2 - \gamma_\nu^2}{(\omega - \omega_\nu)^2 + \gamma_\nu^2} \cos \phi - \frac{2\gamma_\nu (\omega - \omega_\nu)}{(\omega - \omega_\nu)^2 + \gamma_\nu^2} \sin \phi \right], \quad (4.16)$$

όπου $\omega_\nu - i\gamma_\nu$ η θέση ενός πόλου του πίνακα \mathbf{S} στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο συχνοτήτων

και ϕ μια φάση, η οποία θεωρείται περίπου σταθερή κοντά στην περιοχή του συντονισμού και περιγράφει πλήρως τη μορφή του συντελεστή διέλευσης. Στην περίπτωση που υπάρχει ένας αριθμός $i = 1, 2, \dots$ ψευδοδέσμιων καταστάσεων σε μια σχετικά μικρή περιοχή συχνοτήτων, ο συντελεστής διέλευσης μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από τη σχέση [222]

$$\mathcal{T} \approx \cos^2(\pm\delta_1 \pm \delta_2 \pm \dots - \phi) , \quad (4.17)$$

όπου ϕ είναι μια περίπου σταθερή φάση που περιέχει το τμήμα των φασικών μετατοπίσεων που δεν σχετίζεται με τον συντονισμό, ενώ τα δ_i , που σχετίζονται με τον συντονισμό, δίνονται από τις

$$\begin{aligned} \sin \delta_i &= \frac{\gamma_i}{\left[(\omega - \omega_i)^2 + \gamma_i^2\right]^{1/2}} \\ \cos \delta_i &= -\frac{\omega - \omega_i}{\left[(\omega - \omega_i)^2 + \gamma_i^2\right]^{1/2}} , \quad i = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4.18)$$

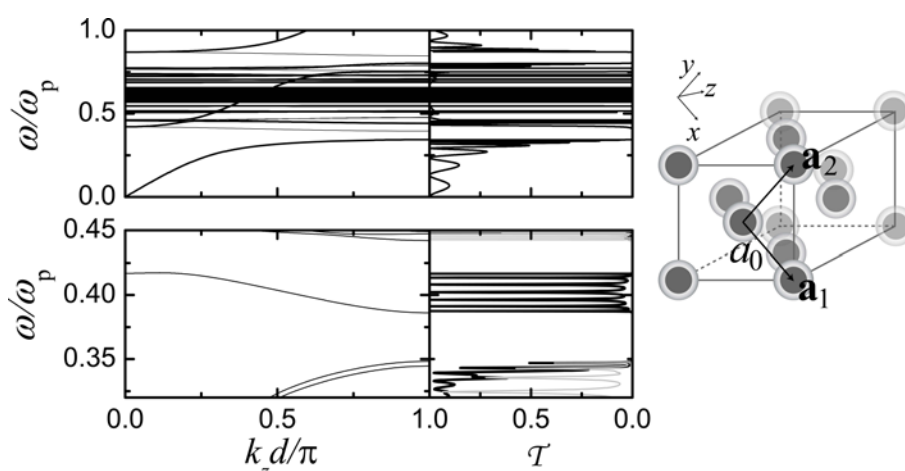
Για παράδειγμα, μέχρι τη συχνότητα $0.5\omega_p$, όπου εμφανίζονται όπως προαναφέρθηκε δύο πλασματικές καταστάσεις συντονισμού: $\omega_1 = 0.353\omega_p$, $\gamma_1 = 0.043\omega_p$ και $\omega_2 = 0.452\omega_p$, $\gamma_2 = 0.0012\omega_p$, ο συντελεστής διέλευσης δίνεται με καλή ακρίβεια από τον τύπο $\mathcal{T} = \cos^2(\delta_1 + \delta_2 - \phi)$ με $\phi = 181.1^\circ$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.3.

Στο κάτω τμήμα του Σχ. 4.3. παρουσιάζουμε τους συντελεστές διέλευσης και απορρόφησης αν ληφθεί υπόψη η απορρόφηση από το μεταλλικό υλικό του σωματιδίου θέτοντας στην Εξ. (3.1) $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$ και $\tau^{-1} = 0.01\omega_p$, τιμές κατάλληλες για τον άργυρο και τον χρυσό, αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι, σε σύγκριση με την περίπτωση όπου δεν υπήρχε απορρόφηση, οι έντονες κορυφές συντονισμού στο φάσμα διέλευσης, που προέρχονται από καταστάσεις με μεγάλο χρόνο ζωής, χάνονται λόγω της απορρόφησης και ουσιαστικά μόνο η διπολική και η τετραπολική κατάσταση εκδηλώνονται στο φάσμα διέλευσης. Αντίστοιχα, στο φάσμα απορρόφησης εμφανίζονται κορυφές συντονισμού στις περιοχές συχνοτήτων αυτών των πλασματικών καταστάσεων.

4.4 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου

Θα εξετάσουμε τώρα έναν κρύσταλλο fcc, από τους ίδιους μεταλλικούς νανοφλοιούς που περιγράψαμε στο προηγούμενο εδάφιο, τον οποίο θεωρούμε ως επαλληλία επιπέδων (001), που ορίζονται από τα θεμελιώδη διανύσματα $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0, 0)$ και $\mathbf{a}_2 = a_0(0, 1, 0)$, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 4.4. Παίρνουμε $a_0 = 3c/\omega_p$, οπότε η πλεγματική σταθερά του fcc είναι $a = 3\sqrt{2}c/\omega_p$, ενώ η απόσταση μεταξύ των διαδοχικών επιπέδων είναι $d = a_0\sqrt{2}/2$, και αγνοούμε σκόπιμα την απορρόφηση από το μέταλλο θέτοντας $\tau^{-1} = 0$ στην Εξ. (3.1) έτσι ώστε η φωτονική δομή ζωνών να ερμηνεύεται με σαφή τρόπο. Στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 4.4 δείχνουμε τη φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κάθετα στην επιφάνεια (001). Η συμμετρία των ζωνών κατά μήκος αυτής της διεύθυνσης ($\Delta_1, \Delta_2, \Delta_1', \Delta_2', \Delta_5$) είναι αυτή της ομάδας C_{4v} [114]. Οι ζώνες $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_1', \Delta_2'$ είναι μη εκφυλισμένες, ενώ οι Δ_5 είναι διπλά εκφυλισμένες. Σημειώνεται ότι η επιφάνεια (001) του κρυστάλλου είναι επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας του κρυστάλλου και κατά συνέπεια οι ζώνες εμφανίζονται σε ζεύγη:

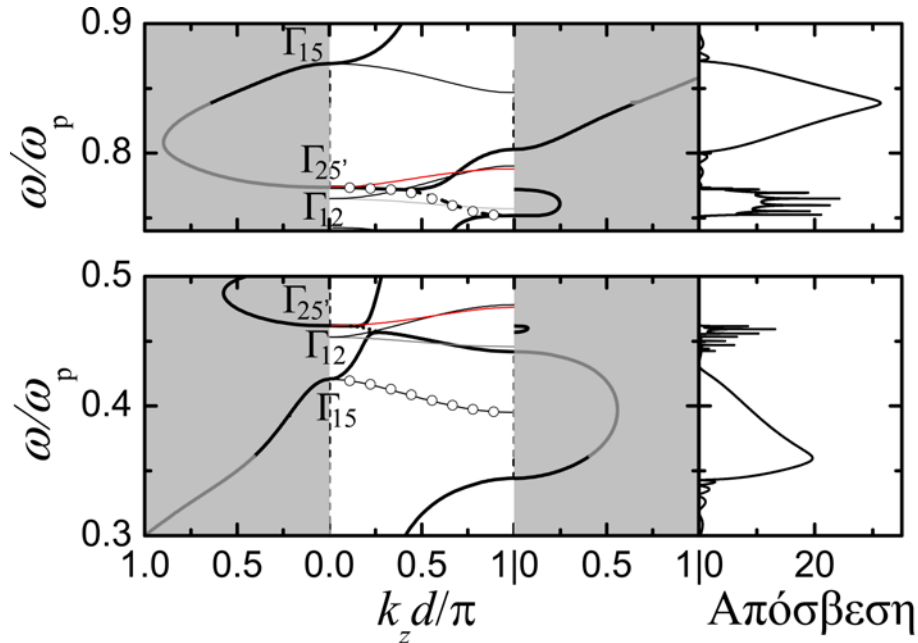
$k_z(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})$ και $-k_z(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})$. Για τον λόγο αυτό, στο σχήμα δείχνουμε μόνο τις ζώνες για θετικό k_z . Σε χαμηλές συχνότητες παίρνουμε μια γραμμική σχέση διασποράς, συμμετρίας Δ_5 , όπως αναμένεται για διάδοση σε ομοιογενές ισοδύναμο μέσο [196]. Σε υψηλότερες συχνότητες η δομή των ζωνών χαρακτηρίζεται από επίπεδες ζώνες, σχεδόν χωρίς διασπορά, που προέρχονται από καταστάσεις επιφανειακών πλασμονίων των νανοφλοιιών. Εξαιτίας του υβριδισμού ανάμεσα στις εκτεταμένες και τις επίπεδες ζώνες ίδιας συμμετρίας ανοίγουν χάσματα συχνότητων. Ο υβριδισμός είναι ισχυρότερος στην περίπτωση της ζώνης διπολικού συντονισμού, λόγω της σχετικά μεγαλύτερης χωρικής έκτασης των αντίστοιχων καταστάσεων, και κατά συνέπεια το αντίστοιχο χάσμα έχει μεγαλύτερο εύρος.



Σχήμα 4.4: Ένας φωτονικός κρύσταλλος fcc μεταλλικών νανοφλοιιών αποτελούμενων από πυρήνα SiO_2 ακτίνας $S_1 = 0.7c/\omega_p$ και μεταλλικό περίβλημα πάχους $C = 0.3c/\omega_p$, που χτίζεται ως επαλληλία διαδοχικών επιπέδων (001), όπως ορίζονται από τα θεμελιώδη διανύσματα $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0, 0)$ και $\mathbf{a}_2 = a_0(0, 1, 0)$. Πάνω διαγράμματα: Η φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου, πλεγματικής σταθεράς $a = a_0\sqrt{2} = 3\sqrt{2}c/\omega_p$, χωρίς απορρόφηση, στον αέρα, κατά τη διεύθυνση [001]. Οι χοντρές και λεπτές γραμμές παριστούν τις διπλά εκφυλισμένες και μη εκφυλισμένες ζώνες, αντίστοιχα. Δίπλα στο διάγραμμα ζωνών δείχνουμε και τον συντελεστή διέλευσης για ένα πλακίδιο του κρυστάλλου αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001). Κάτω διαγράμματα: Η φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.24, 0.18)$, και ο αντίστοιχος συντελεστής διέλευσης για πρόσπτωση TM (μαύρη γραμμή) και TE (γκρι γραμμή) πολωμένου φωτός με $\mathbf{q}_{\parallel} = \pi/a_0(0.24, 0.18)$ σε πλακίδιο αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου.

Στο δεξιό μέρος του Σχ. 4.4 δείχνουμε τον συντελεστή διέλευσης για κάθετη πρόσπτωση ($\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$) σε ένα πλακίδιο αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου. Όπως αναλύσαμε στο Εδ. 3.1, ο συντελεστής διέλευσης παρουσιάζει τις γνωστές ταλαντώσεις Fabry-Perot, με περίοδο $k_z d/\pi = 1/8$, που αναπαράγουν τις διπλά εκφυλισμένες ζώνες του κρυστάλλου. Όμοια με τα Σχ. 4.1 και 4.3, για ανώτερης τάξης πολύπολα οι συντονισμοί του συντελεστή διέλευσης (όπως και οι ζώνες συχνότητων) πυκνώνουν, οδηγώντας σταδιακά σε ένα σχεδόν συνεχές φάσμα.

Ο αριθμός των ζωνών που φαίνονται στο Σχ. 4.4 είναι ο αναμενόμενος από τον εκφυλισμό των συντονισμών των μεμονωμένων νανοφλοιών. Για παράδειγμα, όπως φαίνεται καλύτερα στο Σχ. 4.5, σε συχνότητα $0.42\omega_p$ οι διπολικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου των μεμονωμένων νανοφλοιών δίνουν μια τριπλά εκφυλισμένη κατάσταση (συμμετρίας Γ_{15}) για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$, η οποία κατά μήκος της διεύθυνσης $[001]$ χωρίζεται σε μία διπλά εκφυλισμένη και μία μη εκφυλισμένη ζώνη. Η πρώτη, που αντιστοιχεί σε καταστάσεις πολωμένες στο επίπεδο $x - y$ και έχει συμμετρία Δ_5 , υβριδοποιείται με τις ζώνες συμμετρίας Δ_5 του ισοδύναμου μέσου για να δώσει τις ζώνες Δ_5 που φαίνονται στο σχήμα. Η δεύτερη, συμμετρίας Δ_1 , αντιστοιχεί σε καταστάσεις πολωμένες κατά τη διεύθυνση z και δεν μπορεί να διεγερθεί σε κάθετη πρόσπτωση λόγω της εγκάρσιας φύσης του ΗΜ πεδίου. Όμοια, οι τετραπολικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου δίνουν μία τριπλά εκφυλισμένη ($\Gamma_{25'}$) και μία διπλά εκφυλισμένη (Γ_{12}) κατάσταση για $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, οι οποίες χωρίζονται σε μία ζώνη $\Delta_{2'}$ και μία Δ_5 , και μία ζώνη Δ_1 και μία Δ_2 κατά μήκος της διεύθυνσης $[001]$, αντίστοιχα. Χάσματα συχνοτήτων ανοίγουν ως αποτέλεσμα του υβριδισμού μεταξύ της εκτεταμένης ζώνης ισοδύναμου μέσου και των ζωνών συμμετρίας Δ_5 .



Σχήμα 4.5: Μεγέθυνση του διαγράμματος ζωνών του Σχ. 4.4 για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$, στην περιοχή συχνοτήτων των διπολικών και τετραπολικών πλασματικών καταστάσεων τύπου σωματιδίου και τύπου κοιλότητας. Στο διάγραμμα ζωνών, εκτός από τις συνηθισμένες ζώνες συχνοτήτων (πραγματικό k_z) δείχνουμε και τις γραμμές πραγματικής συχνότητας για μιγαδικές ιδιοτιμές k_z που αντιστοιχούν στις διπλά εκφυλισμένες ζώνες (το φανταστικό τους μέρος σχεδιάζεται στις σκιασμένες περιοχές με συνεχείς γραμμές ενώ το πραγματικό στις λευκές περιοχές με διακεκομμένες γραμμές· η μιγαδική ζώνη με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος σε κάθε συχνότητα σχεδιάζεται με μαύρη γραμμή). Με λεπτές μαύρες, γκρι, και κόκκινες γραμμές παριστώνται οι μη εκφυλισμένες ζώνες συμμετρίας Δ_1 , Δ_2 , και $\Delta_{2'}$, αντίστοιχα. Δίπλα στα διαγράμματα ζωνών παρουσιάζεται ο συντελεστής απόσβεσης.

Οι μη εκφυλισμένες ζώνες κατά μήκος της διεύθυνσης [001] προέρχονται από ασθενή αλληλεπίδραση μεταξύ των αντίστοιχων δέσμιων καταστάσεων του ΗΜ πεδίου, εντοπισμένων σε διαδοχικά επίπεδα (001) σκεδαστών. Προκειμένου να δείξουμε τα παραπάνω, αναζητούμε ιδιοκαταστάσεις του ΗΜ πεδίου για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$ σε ένα πλακίδιο αποτελούμενο από $N_L = 8$ επίπεδα νανοφλοιών, χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.117). Στην περιοχή συχνοτήτων κάθε μιας από αυτές τις ζώνες παίρνουμε οκτώ ιδιοσυχνότητες, οι οποίες, αν σχεδιαστούν συναρτήσει του ανηγμένου κυματάρθμου $k_z = \kappa\pi/(N_L + 1)d$, $\kappa = 1, 2, \dots, N_L$, αναπαράγουν τις αντίστοιχες καμπύλες διασποράς του άπειρου κρυστάλλου, όπως φαίνεται με ανοιχτούς κύκλους στο Σχ. 4.5 για τη χαμηλότερη μη εκφυλισμένη ζώνη, Δ_1 . Η ζώνη αυτή, οπτικά ανενεργή για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$, επιζεί για $\mathbf{k}_{\parallel} \neq \mathbf{0}$, οπότε και συζεύγνυται με ένα προσπίπτον κύμα του ίδιου \mathbf{k}_{\parallel} , οδηγώντας σε μετρήσιμο συντελεστή διέλευσης. Πράγματι, κατά μήκος μιας τυχαίας διεύθυνσης όλες οι ζώνες ανήκουν στην ταυτοτική αναπαράσταση της τετριμμένης ομάδας [114], και κατά συνέπεια διεγείρονται, τουλάχιστον θεωρητικά, από ένα κατάλληλο προσπίπτον κύμα οποιασδήποτε πόλωσης. Για παράδειγμα, όπως φαίνεται στα κάτω διαγράμματα του Σχ. 4.4, κοντά στα όρια του χάσματος, για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.24, 0.18)$, ακόμα και στην περιοχή όπου υπάρχει μία μόνο ζώνη (από $0.344\omega_p$ μέχρι $0.349\omega_p$), τόσο η πόλωση TE όσο και η TM δίνουν σημαντικό συντελεστή διέλευσης. Αντίθετα, η μη εκφυλισμένη ζώνη στην περιοχή συχνοτήτων από $0.386\omega_p$ έως $0.417\omega_p$ συζεύγνυται κατά κύριο λόγο με TM πολωμένο προσπίπτον φως και ο συντελεστής διέλευσης για TE πολωμένο φως σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων είναι αμελητέος. Αυτή η επιλεκτική διέγερση ερμηνεύεται από το γεγονός ότι η εν λόγω ζώνη αντιστοιχεί στην ανενεργή κατά τη διεύθυνση [001] ζώνη Δ_1 , η οποία προέρχεται από διπολικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου που σχετίζονται με ταλαντώσεις ελεύθερων ηλεκτρονίων κατά τη διεύθυνση z . Προφανώς αυτές οι καταστάσεις διεγείρονται μόνο από ένα ηλεκτρικό πεδίο που έχει μη μηδενική συνιστώσα στη διεύθυνση z , άρα μόνο από TM πολωμένο φως. Φυσικά, σε ένα πλέγμα νανοφλοιών σχηματίζονται συλλογικές πλασμονικές καταστάσεις, η περιγραφή των οποίων με βάση τις αντίστοιχες πολυπολικές καταστάσεις των μεμονωμένων νανοφλοιών είναι μόνο κατά προσέγγιση σωστή. Γι' αυτό και η σύζευξη της ζώνης αυτής με TE πολωμένο φως είναι αμελητέα, αλλά όχι ταυτοτικά μηδενική.

Στο Σχ. 4.5, εκτός από τις συνηθισμένες ζώνες συχνοτήτων (πραγματικό k_z), δείχνουμε και τις γραμμές πραγματικής συχνότητας για μιγαδικές ιδιοτιμές k_z που αντιστοιχούν στις διπλά εκφυλισμένες ζώνες. Όπως είπαμε, οι γραμμές αυτές αποτελούν τις αναλυτικές προεκτάσεις των πραγματικών ζωνών στο μιγαδικό επίπεδο k_z . Η μιγαδική ζώνη κατάλληλης συμμετρίας (Δ_5 στην περίπτωση μας) με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος στην περιοχή ενός χάσματος σχεδιάζεται με μαύρο χρώμα και καθορίζει τη διέλευση ενός κύματος από ένα πεπερασμένο πλακίδιο του κρυστάλλου σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων για δεδομένη τιμή του \mathbf{k}_{\parallel} παίρνουμε $\ln \mathcal{T}(\omega) = -2dN_L \text{Im}k_z(\omega) + \text{σταθ.}$. Αυτό παρατηρείται πράγματι στο Σχ. 4.5, όπου δείχνουμε τον συντελεστή διέλευσης σε λογαριθμική κλίμακα (απόσβεση) για ένα κύμα που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο του κρυστάλλου από $N_L = 8$ επίπεδα (001). Στην περιοχή του πρώτου χάσματος, κάτω από τη συχνότητα $0.362\omega_p$ η διέλευση καθορίζεται από τη μιγαδική ζώνη στα δεξιά του διαγράμματος και πάνω από αυτή τη συχνότητα από τη ζώνη στα αριστερά του διαγράμματος. Αντίστοιχα, στο χάσμα που εκτείνεται από $0.803\omega_p$ μέχρι $0.869\omega_p$ η διέλευση καθορίζεται από τη δεξιά μιγαδική ζώνη μέχρι τη συχνότητα $0.838\omega_p$ και από την αριστερή μιγαδική ζώνη πάνω από αυτή τη συχνότητα.

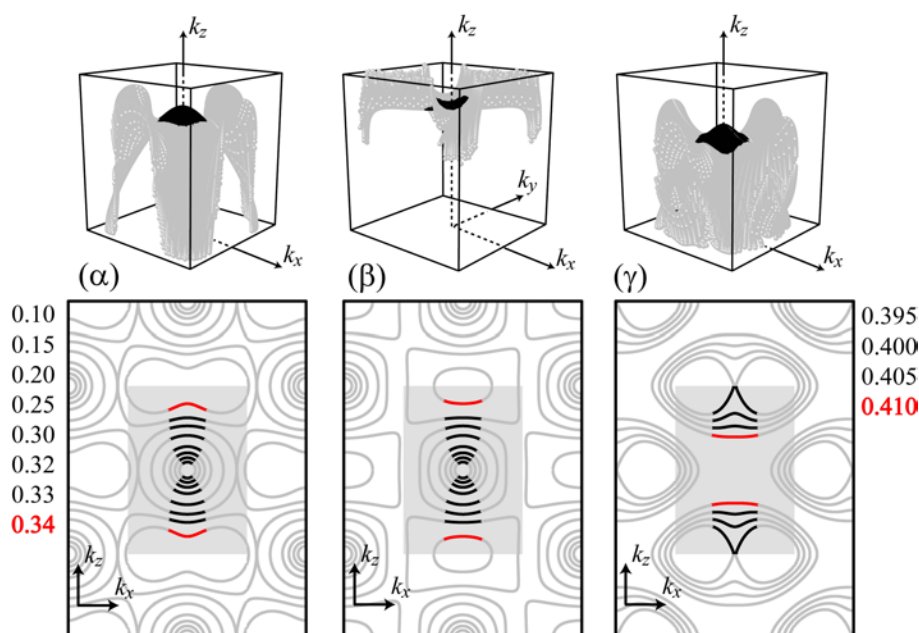
Οι δομές συντονισμού στον συντελεστή διέλευσης του πλακιδίου στην περιοχή $0.441\omega_p$

έως $0.461\omega_p$ και $0.751\omega_p$ έως $0.772\omega_p$, δηλαδή στις περιοχές των χασμάτων όπου οι διπλά εκφυλισμένες ζώνες με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος είναι μιγαδικές με πραγματικό μέρος $\text{Re}k_z \neq 0, 1$ - και άρα οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις Bloch έχουν μη μηδενικό πραγματικό μέρος - οφείλονται σε πλασμονικούς συντονισμούς εντοπισμένους γύρω από τα μεμονωμένα επίπεδα, που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Αξίζει να σημειωθεί ότι οι συντονισμοί του πλακιδίου εμφανίζονται σε συχνότητες κατά μήκος της γραμμής πραγματικής συχνότητας που αντιστοιχούν σε $\text{Re}k_z d/\pi = \kappa/(N_L + 1)$, $\kappa = 1, 2, \dots, N_L$, όπου $N_L = 8$ είναι ο αριθμός των επιπέδων του πλακιδίου, όπως φαίνεται με κύκλους στο Σχ. 4.5 για τη ζώνη μεταξύ $0.751\omega_p$ έως $0.772\omega_p$.

4.5 Αρνητική διάθλαση και φθίνοντα κύματα

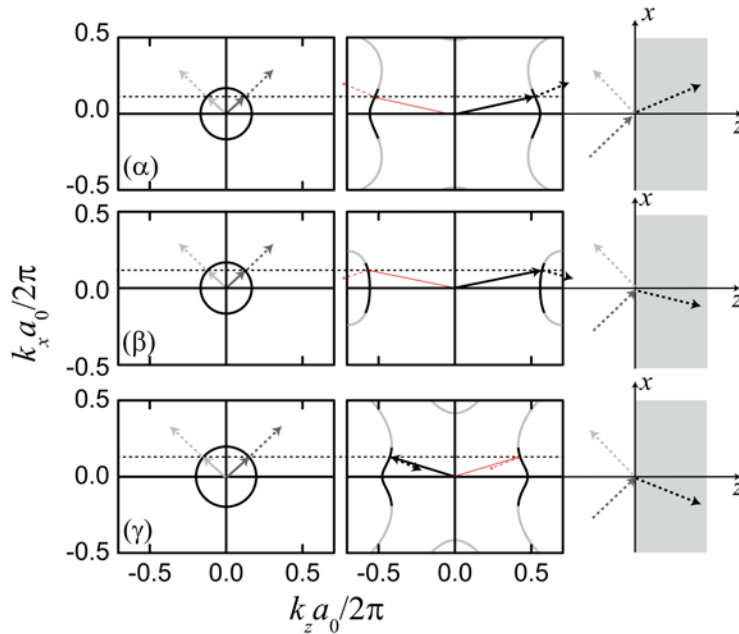
Μια ενδιαφέρουσα περιγραφή του φωτονικού κρυστάλλου που μελετήσαμε στο προηγούμενο εδάφιο, η οποία προσφέρει ταυτόχρονα πληροφορίες για τη διαθλαστική συμπεριφορά του, μπορεί να γίνει μέσω των επιφανειών σταθερής συχνότητας, $\omega(\mathbf{k}) = \text{σταθ.}$, για κάποιες χαρακτηριστικές συχνότητες, όπως συζητήθηκε στο Εδ. 2.8. Στο Σχ. 4.6 παρουσιάζουμε τέτοιες επιφάνειες, καθώς και τις προβολές τους στο επίπεδο $k_x - k_z$. Σημειώνουμε ότι για $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$, $0 < k_x < \pi/a_0$, δηλαδή κατά μήκος της διεύθυνσης \overline{GX} της EZB (βλ. Σχ. 2.6), οι ιδιοκαταστάσεις του ηλεκτρικού πεδίου μπορούν να ταξινομηθούν ως άρτιες ή περιττές ως προς ανάκλαση στο επίπεδο $x - z$, και διεγείρονται από TM ή TE πολωμένα προσπίπτοντα κύματα, αντίστοιχα. Στο Σχ. 4.6 οι καμπύλες σταθερής συχνότητας που σχετίζονται με τις άρτιες και περιττές καταστάσεις παρουσιάζονται στην περιοχή συχνοτήτων μεταξύ $0.10\omega_p$ και $0.34\omega_p$, δηλαδή κάτω από το χάσμα [διαγράμματα (α) και (β)]. Το σκιασμένο ορθογώνιο αντιπροσωπεύει την προβολή της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} στο επίπεδο $k_x - k_z$. Οι μαύρες και γκρι γραμμές αντιστοιχούν σε κύματα που διαδίδονται ή φθίνουν στο περιβάλλον μέσο (αέρα), αντίστοιχα. Καθώς η συχνότητα αυξάνεται, οι καμπύλες σταθερής συχνότητας για τις περιττές καταστάσεις μετατρέπονται σταδιακά από ελλείψεις σε υπερβολές, ενώ οι αντίστοιχες καμπύλες για τις άρτιες καταστάσεις διατηρούν τη θετική τους καμπυλότητα. Οι αντίστοιχες 3D επιφάνειες σταθερής συχνότητας παρουσιάζονται, για πληρότητα, στο πάνω μισό της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} , στη συχνότητα $0.34\omega_p$. Το κάτω μισό των επιφανειών είναι συμμετρικό και δεν χρειάζεται να παρουσιαστεί. Στο Σχ. 4.6(γ) παρουσιάζουμε παρόμοιες καμπύλες σταθερής συχνότητας, καθώς και την αντίστοιχη 3D επιφάνεια σε συχνότητα $0.40\omega_p$, στην περιοχή μεταξύ $0.395\omega_p$ και $0.410\omega_p$ όπου, όπως αναφέραμε νωρίτερα, υπάρχει μόνο μία, μη εκφυλισμένη ζώνη, άρτια ως προς ανάκλαση ως προς το επίπεδο $x - z$. Σημειώνουμε ότι αυτή η περιοχή συχνοτήτων είναι κοντά στο όριο περίθλασης για κύματα που προσπίπτουν από τον αέρα. Με βάση τον συμβολισμό που χρησιμοποιούμε, τα περιθλώμενα κύματα θα εμφανίζονταν ως μαύρα τμήματα των καμπυλών σταθερής συχνότητας που προέρχονται από γειτονικές ανηγμένες ζώνες \mathbf{k} . Συνεπώς, η μη εκφυλισμένη αυτή ζώνη είναι η υψηλότερη σε συχνότητα ζώνη για την οποία παίρνει κανείς μία και μοναδική διαθλώμενη ακτίνα.

Όπως είπαμε, υπάρχει μια στενή περιοχή συχνοτήτων, από $0.33\omega_p$ μέχρι το χάσμα, όπου οι καμπύλες σταθερής συχνότητας που αντιστοιχούν στις περιττές καταστάσεις γίνονται υπερβολικές σε όλο το μήκος των μαύρων τμημάτων τους. Το γεγονός αυτό υποδηλώνει ότι θα παρατηρείται το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης όταν TE πολωμένο φως προσπίπτει από τον αέρα στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$ υπό οποιαδήποτε γωνία.



Σχήμα 4.6: Καμπύλες σταθερής συχνότητας στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τον κρύσταλλο μεταλλικών νανοφλοιών του Σχ. 4.4, συσχετισμένες με (α) τις άρτιες και (β) τις περιττές καταστάσεις, για συχνότητες που αυξάνονται από το κέντρο προς τα έξω (οι συχνότητες παρουσιάζονται στο αριστερό περιθώριο σε μονάδες ω_p). Το σκιασμένο ορθογώνιο παριστά την προβολή της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} σε αυτό το επίπεδο. Μόνο τα μαύρα τμήματα των καμπυλών αντιστοιχούν σε κύματα διαδιδόμενα και έξω από τον κρύσταλλο. Για πληρότητα, οι αντίστοιχες 3Δ επιφάνειες παρουσιάζονται στο πάνω μισό της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} , στη συχνότητα $0.34\omega_p$. (γ) Καμπύλες σταθερής συχνότητας που σχετίζονται με τη μοναδική, άρτια ζώνη στην περιοχή συχνοτήτων που φαίνεται στο δεξιό περιθώριο (σε μονάδες ω_p). Οι συχνότητες αυξάνονται από έξω προς το κέντρο. Η αντίστοιχη 3Δ επιφάνεια παρουσιάζεται για πληρότητα στο πάνω μισό της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} , στη συχνότητα $0.40\omega_p$.

Για να το επιβεβαιώσουμε ακολουθούμε τη διαδικασία υπολογισμού της ταχύτητας ομάδος του διαθλώμενου κύματος που περιγράψαμε στο Εδ. 2.8, στη συχνότητα $0.34\omega_p$. Κατά την πρόσπτωση ΗΜ ακτινοβολίας σε μια επιφάνεια του κρυστάλλου η παράλληλη στην επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος, k_x στην περίπτωση μας (έχοντας θεωρήσει $k_y = 0$), διατηρείται. Στο Σχ. 4.7 η συνθήκη αυτή παρέχεται από τις οριζόντιες διακεκομμένες γραμμές. Οι τομές αυτών των γραμμών με τις καμπύλες σταθερής συχνότητας του αέρα (οι κύκλοι στα αριστερά διαγράμματα) καθορίζουν το προσπίπτον (θετικό k_z) και το ανακλώμενο (αρνητικό k_z) κάθε φορά κύμα, ενώ οι τομές τους με τις καμπύλες σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου (δεξιά διαγράμματα) παρέχουν σε κάθε περίπτωση δύο πιθανά κυματανύσματα για τα διαθλώμενα κύματα. Προκειμένου να προσδιορίσουμε τα πραγματικά διαθλώμενα κύματα σε κάθε περίπτωση υπολογίζουμε τη διεύθυνση της ταχύτητας ομάδος, $\mathbf{v}_g \equiv \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})$, η οποία καθορίζει τη ροή ενέργειας του κύματος. Όπως αναφέραμε στο Εδ. 2.8, η ταχύτητα ομάδος δεν είναι απαραίτητα παράλληλη στο κυματανύσμα, αλλά είναι εξ ορισμού κάθετη στην επιφάνεια



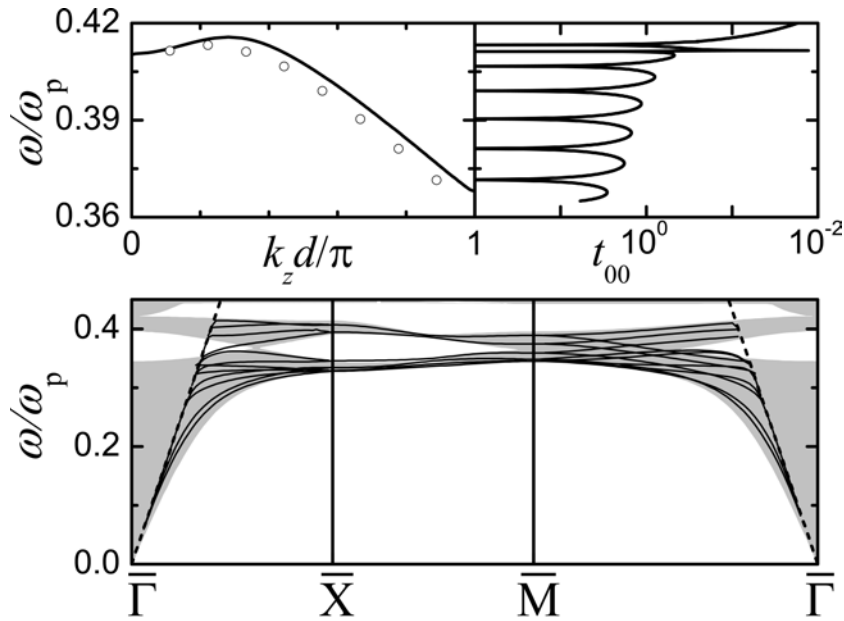
Σχήμα 4.7: Διαγράμματα κυματανυσμάτων στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τις άρτιες (α) και περιττές (β) καταστάσεις στη συχνότητα $0.34\omega_p$, και για τις άρτιες καταστάσεις στη συχνότητα $0.40\omega_p$ (γ), για τον κρύσταλλο του Σχ. 4.4. Στα αριστερά διαγράμματα παρουσιάζονται οι καμπύλες σταθερής συχνότητας στον αέρα και στα δεξιά οι αντίστοιχες καμπύλες στον κρύσταλλο. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή παρέχει τη διατήρηση της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Τα συνεχή βέλη παριστούν το προσπίπτον (σκούρο γκρι), ανακλώμενο (ανοιχτό γκρι) και διαθλώμενο (μαύρο) κυματόνυμα στα διάφορα μέσα. Με διακεκομμένα βέλη κάθετα στις καμπύλες σταθερής συχνότητας δείχνουμε τις αντίστοιχες ταχύτητες ομάδος. Τα λεπτά κόκκινα βέλη αντιστοιχούν σε κυματανύσματα και ταχύτητες ομάδος διαθλώμενων κυμάτων για τα οποία η συνιστώσα k_x διατηρείται αλλά παραβιάζεται η αιτιότητα.

σταθερής συχνότητας. Από τα διαγράμματα του Σχ. 4.6 βρίσκουμε ποιά από τις δύο πιθανές κάθετες διευθύνσεις οδηγεί σε αύξουσα συχνότητα και είναι συνεπώς η σωστή διεύθυνση της ταχύτητας ομάδος. Επιπλέον, το διαθλώμενο κύμα θα πρέπει να απομακρύνεται από τη διεπιφάνεια των δύο μέσων, προς το εσωτερικό του κρυστάλλου, δηλαδή να έχει θετική συνιστώσα z της \mathbf{v}_g (αρχή της αιτιότητας) [87,89,90]. Έτσι, στην περίπτωση μας επιλέγουμε ως διαθλώμενο κύμα αυτό με τη θετική συνιστώσα x της \mathbf{v}_g για τις άρτιες καταστάσεις [Σχ. 4.7(α)], και αυτό με την αρνητική x συνιστώσα της \mathbf{v}_g για τις περιττές καταστάσεις [Σχ. 4.7(β)]. Με άλλα λόγια, για \mathbf{k}_{\parallel} κατά μήκος της διεύθυνσης ΓX της EZB, ο κρύσταλλος παρουσιάζει θετική (συνηθισμένη) διάθλαση για TM πολωμένα προσπίπτοντα κύματα και αρνητική διάθλαση για TE πολωμένα κύματα, προσπίπτοντα υπό οποιαδήποτε γωνία, στη συχνότητα $0.34\omega_p$. Ωστόσο, όπως συζητήσαμε στο προηγούμενο εδάφιο, για \mathbf{k}_{\parallel} κατά μήκος μιας τυχαίας διεύθυνσης της EZB, τόσο τα TE όσο και τα TM πολωμένα κύματα συζεύγνυνται σε σημαντικό βαθμό

και με τις δύο ζώνες στη δεδομένη συχνότητα, οδηγώντας σε δύο διαθλώμενες ακτίνες, μία θετικά και μία αρνητικά (διπλοθλαστικότητα). Αρνητική διάθλαση χωρίς διπλοθλαστικότητα για κάθε γωνία πρόσπτωσης παίρνουμε σε συχνότητα $0.40\omega_p$, όπου, όπως αναφέραμε, υπάρχει μία και μοναδική ζώνη. Η ζώνη αυτή διεγείρεται μόνο από TM πολωμένο φως, δρα ως φίλτρο πολώσεων, και μπορεί να αξιοποιηθεί σε σχετικές εφαρμογές. Η συζήτηση για τον προσδιορισμό της διαθλώμενης ακτίνας είναι ανάλογη με την προηγούμενη περίπτωση και παρουσιάζεται στο Σχ. 4.7(γ), με τη μόνη διαφορά ότι τώρα το διαθλώμενο κυματόνισμα έχει διεύθυνση που απομακρύνεται από τον κρύσταλλο.

Μέχρι στιγμής αγνοήσαμε τις απώλειες λόγω απορρόφησης στο μεταλλικό υλικό. Η ρεαλιστική μιγαδική διηλεκτρική συνάρτηση των μετάλλων μπορεί να ληφθεί υπόψη θέτοντας $\tau^{-1} \neq 0$ στην Εξ. (3.1). Το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης Drude μετατρέπει όλες τις ζώνες σε μιγαδικές, υπό την έννοια ότι όλα τα κυματόνισμα αποχτούν ένα μικρό φανταστικό μέρος που λαμβάνει υπόψη τις απώλειες. Θεωρώντας $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$, που αντιστοιχεί στον άργυρο, το φανταστικό μέρος του $k_z d/\pi$ για τις ζώνες που μας απασχολούν είναι πάντα μικρότερο από 0.015, από το οποίο συνάγεται ένα μήκος διάδοσης της τάξης των δέκα πλεγματικών σταθερών κατά τη διεύθυνση διάδοσης. Αυτό σημαίνει ότι μόνο σχετικά λεπτά πλακίδια, αποτελούμενα από λίγα 2Δ επίπεδα νανοφλοιών, μπορούν να φανούν χρήσιμα σε πρακτικές εφαρμογές σχετιζόμενες με αρνητική διάθλαση και υπερφακούς. Οι απώλειες λόγω απορρόφησης μπορούν να μειωθούν περαιτέρω μεταβάλλοντας τις γεωμετρικές παραμέτρους του συστήματος, όπως για παράδειγμα το πάχος του μεταλλικού φλοιού [223].

Προκειμένου ένα πλακίδιο φωτονικού κρυστάλλου να μπορεί να αξιοποιηθεί σε εφαρμογές υπερφακών θα πρέπει να μπορεί να μεταφέρει τα φθίνοντα κύματα στην άλλη του πλευρά χωρίς εξασθένιση, στην περιοχή συχνοτήτων που εμφανίζεται αρνητική διάθλαση. Αυτό επιτυγχάνεται, εν γένει, μέσω επίπεδων επιφανειακών καταστάσεων ή ιδιοκαταστάσεων πλακιδίου, αν υπάρχουν [90]. Στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 4.8 παρουσιάζουμε την προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου στις γραμμές συμμετρίας της EZB που σχετίζεται με την επιφάνεια (001) (Σχ. 2.6). Οι σκιασμένες περιοχές αντιστοιχούν σε περιοχές καταστάσεων του HM πεδίου· για κάθε συχνότητα σε σκιασμένη περιοχή, για το δεδομένο \mathbf{k}_{\parallel} , υπάρχει τουλάχιστον μία διαδιδόμενη HM κατάσταση στον άπειρο κρύσταλλο. Οι λευκές περιοχές αντιστοιχούν σε χάσματα συχνοτήτων για το δεδομένο \mathbf{k}_{\parallel} . Προφανώς, απόλυτο χάσμα υπάρχει όταν μια λευκή περιοχή συχνοτήτων εκτείνεται σε όλα τα \mathbf{k}_{\parallel} . Η γνώση των καταστάσεων με \mathbf{k}_{\parallel} στο τρίγωνο $\overline{\Gamma X M}$ της EZB και $0 \leq k_z \leq \pi/d$ είναι αρκετή για μια πλήρη περιγραφή όλων των καταστάσεων του άπειρου κρυστάλλου. Οι καταστάσεις με \mathbf{k}_{\parallel} στην υπόλοιπη ζώνη \mathbf{k} υπολογίζονται βάσει της συμμετρίας. Με μαύρες συνεχείς γραμμές δείχνουμε τις ζώνες ιδιοκαταστάσεων ενός πλακιδίου αποτελούμενου από τέσσερα διαδοχικά επίπεδα (001) του κρυστάλλου, ενώ οι διακεκομμένες γραμμές συμβολίζουν τον κώνο φωτός. Είναι φανερό ότι εμφανίζονται τόσες ζώνες τέτοιων ιδιοκαταστάσεων όσος και ο αριθμός των επιπέδων που συνιστούν το πλακίδιο. Οι ιδιοκαταστάσεις αυτές συνοδεύονται από σημαντική αύξηση στο σχετικό στοιχείο του πίνακα διέλευσης, $t_{00}(\equiv S_{01;01}^{++})$ [90], όπως δείχνουμε στο πάνω διάγραμμα του Σχ 4.8, όπου σχεδιάζουμε το μεγαλύτερο κατά μέτρο στοιχείο του πίνακα διέλευσης για ένα πλακίδιο αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001), μαζί με το σχετικό διάγραμμα ζωνών του άπειρου κρυστάλλου, στην περιοχή πάνω από το χάσμα υβριδισμού, για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.6, 0)$. Οι ιδιοσυχνότητες των καταστάσεων πλακιδίου, ω_{κ} , $\kappa = 1, 2, \dots, N_L$ ($N_L = 8$), προκύπτουν από τις



Σχήμα 4.8: Πάνω: Φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 4.4 για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.6, 0)$ (αριστερά) και το μέτρο του μεγαλύτερου στοιχείου του πίνακα διέλευσης, t_{00} , για ένα πλακίδιο του κρυστάλλου αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001). Κάτω: Προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου στην EZB της επιφάνειας (001) κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας που φαίνονται στο Σχ. 2.6. Οι σκιασμένες περιοχές αντιστοιχούν σε διαδιδόμενες καταστάσεις του HM πεδίου και οι λευκές σε χάσματα. Με μαύρες συνεχείς γραμμές παρουσιάζουμε τις σχέσεις διασποράς των ιδιοκαταστάσεων ενός πλακιδίου αποτελούμενου από τέσσερα επίπεδα (001) του κρυστάλλου. Οι διακεκομμένες γραμμές παριστούν τον κώνο φωτός στον αέρα.

θέσεις των μεγίστων του t_{00} , και τα σημεία $(k_{z;\kappa}, \omega_{\kappa})$, με $k_{z;\kappa} = \kappa\pi/(N_L + 1)d$, αναπαράγουν το διάγραμμα ζωνών με αρκετά καλή ακρίβεια όπως φαίνεται με ανοιχτούς κύκλους στο σχήμα. Οι υπολογισμοί μας έδειξαν ότι η ακρίβεια της συμφωνίας στη συχνότητα μεταξύ των ιδιοκαταστάσεων του πλακιδίου και του διαγράμματος ζωνών του άπειρου κρυστάλλου βελτιώνεται δραστικά αυξάνοντας τον αριθμό των επιπέδων, όπως εξάλλου αναμένεται. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι στην περιοχή συχνοτήτων κάτω από το χάσμα εμφανίζονται οκτώ ζώνες ιδιοκαταστάσεων πλακιδίου για ένα πλακίδιο τεσσάρων επιπέδων, τέσσερις για κάθε μία από τις ζώνες σε αυτή την περιοχή. Σε πρακτικές εφαρμογές, για να πετύχει κανείς ικανοποιητική απεικόνιση μιας πηγής μονοχρωματικής ακτινοβολίας, είναι προτιμότερο να υπάρχουν τέτοιες ιδιοκαταστάσεις κοντά, αλλά όχι ακριβώς στη συχνότητα ενδιαφέροντος, γιατί διαφορετικά η ενίσχυση των φθίνοντων κυμάτων είναι τόσο σημαντική ώστε να θολώνει η εικόνα [90]. Από την άλλη πλευρά, σε εφαρμογές έγχρωμης απεικόνισης επιθυμεί κανείς μεγάλο αριθμό τέτοιων ιδιοκαταστάσεων, όσο γίνεται πιο κοντά μεταξύ τους [65]. Σε κάθε περίπτωση, ο αριθμός και οι θέσεις των ιδιοκαταστάσεων πεπερασμένου πλακιδίου μπορούν να ρυθμιστούν με κατάλληλη επιλογή του πάχους του πλακιδίου.

4.6 Ομοιογενοποίηση ανισοτροπικού κρυστάλλου

Προκειμένου να εφαρμόσουμε τη θεωρία ομοιογενοποίησης που προτείναμε στο Εδ. 3.4 σε μια πιο ενδιαφέρουσα, ανισοτροπική περίπτωση, θα θεωρήσουμε έναν ανισοτροπικό κρύσταλλο από τους ίδιους μεταλλικούς νανοφλοιούς που μελετήσαμε και στα προηγούμενα εδάφια. Η μοναδιαία κυψελίδα του τετραγωνικού κρυστάλλου που θα εξετάσουμε παρουσιάζεται στο Σχ. 4.9. Χτίζουμε τον κρύσταλλο ως επαλληλία διαδοχικών τετραγωνικών επιπέδων $x - y$, με πλεγματική σταθερά $a_0 = 3c/\omega_p$, που χωρίζονται από απόσταση $d = 6c/\omega_p$ κατά τη διεύθυνση z . Η μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου, που υπολογίστηκε αγνοώντας προς το παρόν τις απώλειες λόγω απορρόφησης ($\tau^{-1} = 0$), παρουσιάζεται επίσης στο Σχ. 4.9. Για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$, δηλαδή κατά μήκος της διεύθυνσης $[001]$, οι ζώνες έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της σημειακής ομάδας C_{4v} : $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_1', \Delta_2'$, που είναι μονοδιάστατες, και Δ_5 , που είναι διδιάστατη. Όλες οι ζώνες που φαίνονται στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 4.9 έχουν συμμετρία Δ_5 και είναι διπλά εκφυλισμένες. Κατά μήκος κάποιας άλλης διεύθυνσης της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} , που μένει αμετάβλητη στις πράξεις συμμετρίας μιας μικρότερης σημειακής ομάδας που δεν περιέχει μια διδιάστατη μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση, όλες οι ζώνες είναι μη εκφυλισμένες, όπως φαίνεται στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 4.9 για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.16, 0.08)$. Αυτό το χάρισμα των διπλά εκφυλισμένων ζωνών πρέπει να ληφθεί υπόψη θεωρώντας ένα κατάλληλο ανισοτροπικό μέσο. Πρέπει να σημειωθεί ότι, αυστηρά, αυτό το χάρισμα συμβαίνει ακόμα και σε έναν κυβικό κρύσταλλο. Ωστόσο, σε αυτή την περίπτωση η ανισοτροπία είναι πρακτικά αμελητέα, σε συμφωνία με την υπόθεση ενός ομοιογενούς ιστροπικού μέσου, σε χαμηλές και ενδιάμεσες συχνότητες (βλ. Εδ. 3.4).

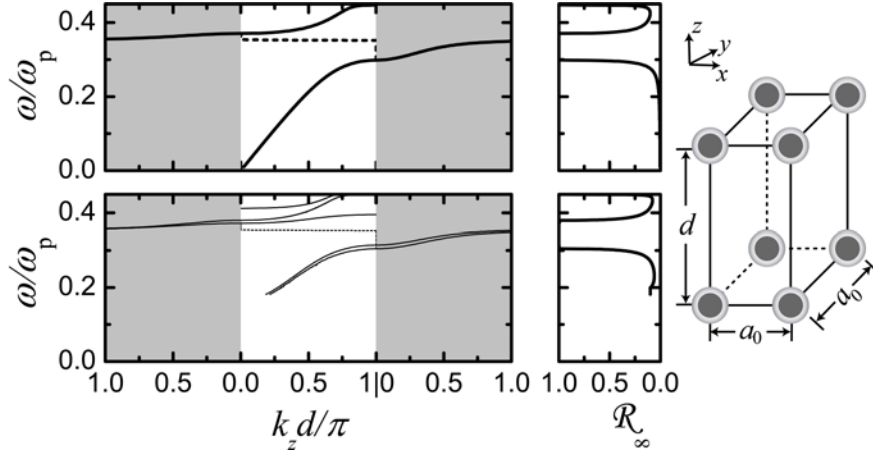
Τα διαγράμματα ζωνών του υπο μελέτη φωτονικού κρυστάλλου, στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, χαρακτηρίζονται από ευρείες ζώνες εκτεταμένων καταστάσεων και στενές ζώνες εντοπισμένων καταστάσεων που προέρχονται από ασθενή αλληλεπίδραση των διπολικών πλασμονικών καταστάσεων τύπου σωματιδίου των μεμονωμένων νανοφλοιών. Η αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών των ζωνών οδηγεί στο άνοιγμα χάσματος υβριδισμού. Μέσα στα χάσματα δεν υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου και οι πραγματικές ζώνες συνεχίζουν αναλυτικά στο μιγαδικό επίπεδο k_z . Στην περιοχή ενός χάσματος, η ζώνη με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος του k_z είναι αυτή που καθορίζει τη διάδοση των ΗΜ κυμάτων στη συγκεκριμένη διεύθυνση, και παρουσιάζεται στις σκιασμένες περιοχές του Σχ. 4.9. Προφανώς, ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου γίνεται μονάδα στην περιοχή του χάσματος.

Ο κρύσταλλος που θεωρήσαμε έχει μονοαξονική συμμετρία, οπότε οι κατάλληλοι ταυστες ισοδύναμων ΗΜ παραμέτρων, Εξ. (1.43), θα απλοποιούνται στη μορφή

$$\overleftrightarrow{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\text{eff}(\parallel)} & & \\ & \epsilon_{\text{eff}(\parallel)} & \\ & & \epsilon_{\text{eff}(z)} \end{pmatrix}, \quad \overleftrightarrow{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{\text{eff}(\parallel)} & & \\ & \mu_{\text{eff}(\parallel)} & \\ & & \mu_{\text{eff}(z)} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

ενώ οι σχέσεις διασποράς (1.46) και (1.48) γίνονται:

$$\frac{q_{\parallel}^2}{\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(z)}} + \frac{q_{(\text{TE})z}^2}{\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}} = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (4.20)$$



Σχήμα 4.9: Η θεμελιώδης κυψελίδα ενός τετραγωνικού φωτονικού κρυστάλλου μεταλλικών νανοφλοιών με $a_0 = 3c/\omega_p$ και $d = 6c/\omega_p$. Αριστερά διαγράμματα: Η μιγαδική δομή ζωνών του κρυστάλλου για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$ (πάνω διάγραμμα) και $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.16, 0.08)$ (κάτω διάγραμμα). Με χοντρές και λεπτές γραμμές παρουσιάζουμε τις διπλά εκφυλισμένες και μη εκφυλισμένες ζώνες, αντίστοιχα. Στις περιοχές των χασμάτων παρουσιάζουμε τις μιγαδικές ζώνες με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος· το πραγματικό τους μέρος παρουσιάζεται με διακεκομμένες γραμμές και το φανταστικό στις σκιασμένες περιοχές. Δεξιά διαγράμματα: Ο αντίστοιχος συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου.

για πόλωση TE, δηλαδή αν το ηλεκτρικό πεδίο είναι κάθετο στον οπτικό άξονα z , και

$$\frac{q_{\parallel}^2}{\varepsilon_{\text{eff}(z)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}} + \frac{q_{(\text{TM})z}^2}{\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}} = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (4.21)$$

για πόλωση TM, δηλαδή αν το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στον οπτικό άξονα, και $\mathbf{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$. Αντίστοιχα, οι συντελεστές ανάκλασης στη διεπιφάνεια μεταξύ του ημιάπειρου φωτονικού κρυστάλλου και ενός ημιάπειρου ομοιογενούς μέσου συναρτήσεων απόκρισης ε και μ , Εξ. (1.49) και (1.51), γράφονται

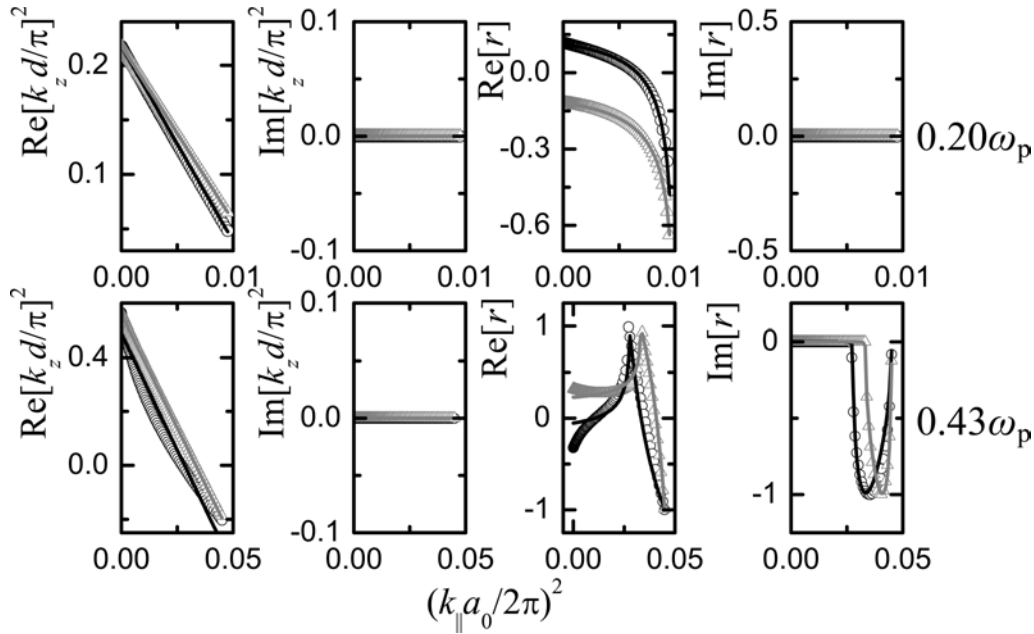
$$r_{12(\text{TE})} = \frac{\sqrt{\varepsilon\mu\omega^2/c^2 - q_{\parallel}^2} - \mu\sqrt{(\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(\parallel)})(\omega^2/c^2) - q_{\parallel}^2}/(\mu_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(z)})}{\sqrt{\varepsilon\mu\omega^2/c^2 - q_{\parallel}^2} + \mu\sqrt{(\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(\parallel)})(\omega^2/c^2) - q_{\parallel}^2}/(\mu_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(z)})} \quad (4.22)$$

και

$$r_{12(\text{TM})} = \frac{\sqrt{\varepsilon\mu\omega^2/c^2 - q_{\parallel}^2} - \varepsilon\sqrt{(\mu_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)})(\omega^2/c^2) - q_{\parallel}^2}/(\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\varepsilon_{\text{eff}(z)})}{\sqrt{\varepsilon\mu\omega^2/c^2 - q_{\parallel}^2} + \varepsilon\sqrt{(\mu_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)})(\omega^2/c^2) - q_{\parallel}^2}/(\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\varepsilon_{\text{eff}(z)})} \quad (4.23)$$

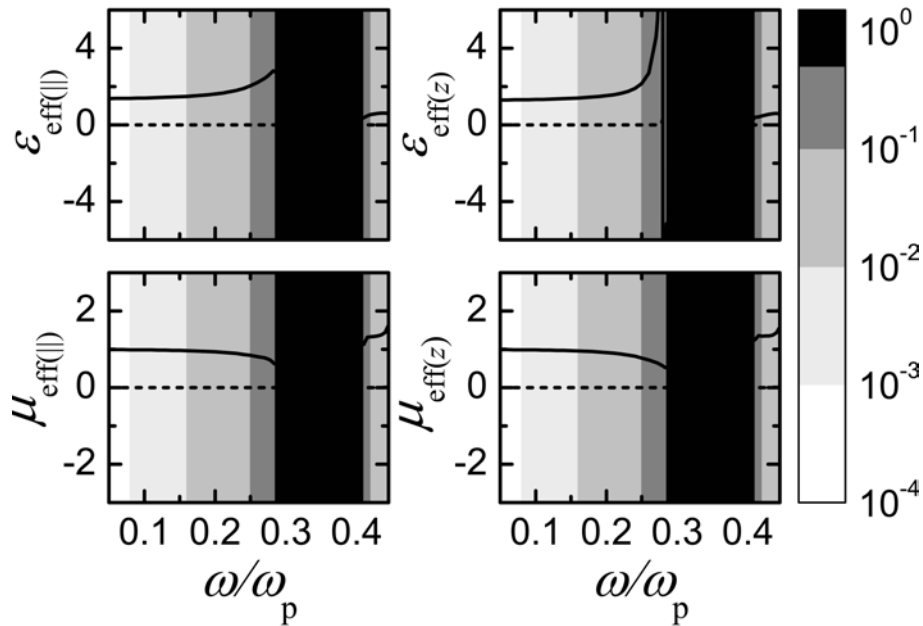
για TE και TM πόλωση, αντίστοιχα.

Πραγματοποιώντας συστηματικούς υπολογισμούς της μιγαδικής δομής ζωνών του άπειρου κρυστάλλου και του συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου κατά μήκος πολλών



Σχήμα 4.10: Καμπύλες προσαρμογής των σχέσεων διασποράς του άπειρου κρυστάλλου και του συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου, που υπολογίζονται με ακριβείς υπολογισμούς μέσω της μεθόδου LMS, για τον φωτονικό κρύσταλλο του Σχ. 4.9, στις Εξ. (4.20), (4.21) και (4.22), (4.23), αντίστοιχα, στην περιοχή των γραμμικών σχέσεων διασποράς ($\omega = 0.20\omega_p$) (πάνω διαγράμματα) και πάνω από το χάσμα ($\omega = 0.43\omega_p$) (κάτω διαγράμματα). Τα μαύρα και γκρι σύμβολα αναφέρονται στις πολώσεις TE και TM, αντίστοιχα.

διευθύνσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικά σημεία $\mathbf{q}_{\parallel} (= \mathbf{k}_{\parallel})$, στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, παίρνουμε ένα σύνολο δεδομένων που θα πρέπει να ικανοποιούν τις σχέσεις (4.20)-(4.23). Πράγματι, σε περιοχές συχνοτήτων έξω από το χάσμα η προσαρμογή των Εξ. (4.20)-(4.23) στα δεδομένα των υπολογισμών είναι εξαιρετική, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.10. Από τις προσαρμογές στις σχέσεις διασποράς παίρνουμε τιμές για τα $\mu_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(z)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, και $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}$ (δύο τιμές), ενώ από τις προσαρμογές στους συντελεστές ανάκλασης παίρνουμε τιμές για τα $\mu_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(z)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, και $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(\parallel)}$ (δύο τιμές). Έτσι καταστρώνουμε ένα σύστημα οκτώ εξισώσεων για τους τέσσερις αγνώστους, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, $\mu_{\text{eff}(\parallel)}$, και $\mu_{\text{eff}(z)}$, το οποίο επιλύουμε με μια δεύτερη (μη γραμμική) διαδικασία ελαχίστων τετραγώνων. Ως ποσοτικό κριτήριο για την ακρίβεια των προσαρμογών σε κάθε συχνότητα υιοθετούμε την αντίστοιχη τυπική απόκλιση. Η εξάρτηση των υπολογισμένων ισοδύναμων HM παραμέτρων από τη συχνότητα παρουσιάζεται στο Σχ. 4.11 μαζί με την αντίστοιχη τυπική απόκλιση σε λογαριθμική κλίμακα. Εκτός από την περιοχή του χάσματος, όπου οι ισοδύναμοι παράμετροι χάνουν τη φυσική σημασία τους [138] και οι διαδικασίες προσαρμογής αποτυγχάνουν τελείως (βλ. Εδ. 3.4), και πολύ κοντά στα χάσματα όπου δεν ισχύει η περιγραφή με όρους τοπικών ισοδύναμων συναρτήσεων απόκρισης, στις υπόλοιπες περιοχές υπολογίζονται ταυιστές ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας με ικανοποιητική ακρίβεια. Η ανισοτροπία στη διηλεκτρική συνάρτηση, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)} - \varepsilon_{\text{eff}(z)}$, μεγαλώνει από 0.07



Σχήμα 4.11: Τανυστές ισοδύναμων HM παραμέτρων (τα πραγματικά και φανταστικά τους μέρη παρουσιάζονται με συνεχείς και διακεκομμένες γραμμές, αντίστοιχα) για τον φωτονικό κρύσταλλο του Σχ. 4.9. Η τυπική απόκλιση των διαδικασιών προσαρμογής στις διάφορες συχνότητες παρουσιάζεται με αποχρώσεις του γκρι σε λογαριθμική κλίμακα. Στις μαύρες περιοχές οι ισοδύναμες HM παράμετροι χάνουν το νόημά τους.

σε χαμηλές συχνότητες μέχρι να γίνει της τάξης του 100 πλησιάζοντας το χάσμα. Αντίθετα, η ανισοτροπία στη μαγνητική διαπερατότητα, $\mu_{\text{eff}(\parallel)} - \mu_{\text{eff}(z)}$ παραμένει μικρότερη του 0.02 σε όλο το εύρος συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, όπως αναμενόταν.

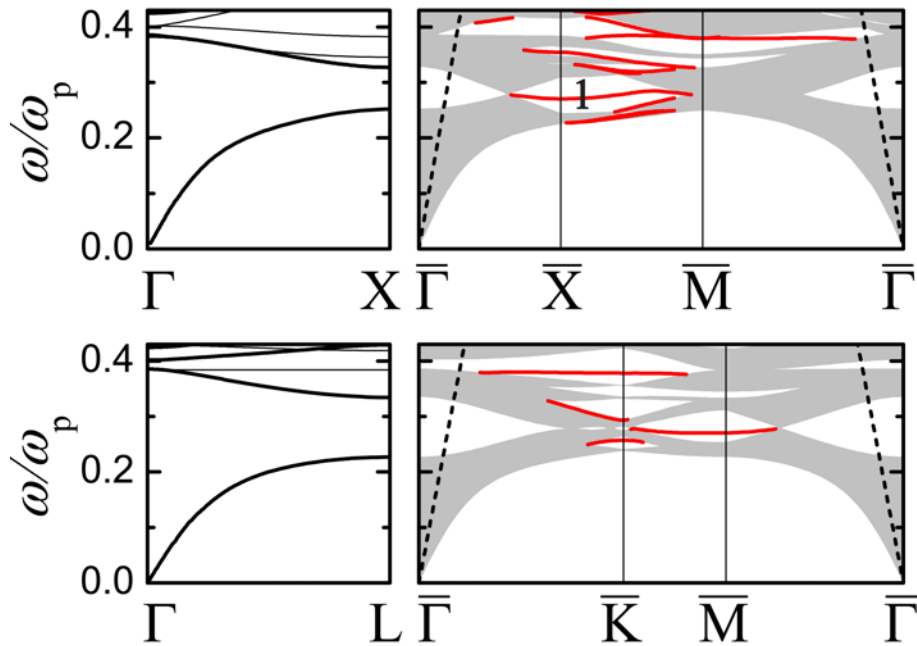
4.7 Επιφανειακές καταστάσεις σε κρυστάλλους μεταλλικών νανοφλοιών

Η πιθανότητα εντοπισμού HM καταστάσεων στην επιφάνεια ενός ημιάπειρου φωτονικού κρυστάλλου διερευνήθηκε θεωρητικά από πολύ νωρίς, από τους Meade *et al.* [224], οι οποίοι έδειξαν ότι τέτοιες καταστάσεις θα πρέπει να υπάρχουν πάντα για κάποιον τερματισμό κάθε επιφάνειας του κρυστάλλου, ενώ στη συνέχεια η ύπαρξη επιφανειακών φωτονικών καταστάσεων επιβεβαιώθηκε και πειραματικά [225]. Εμπνευσμένοι από αυτές τις εργασίες, πολλοί ερευνητές παρουσίασαν αριθμητικές μελέτες των επιφανειακών καταστάσεων σε 2Δ και 3Δ φωτονικούς κρυστάλλους, βασισμένοι κυρίως στην προσέγγιση του υπερπλέγματος [226–232], ενώ εξετάστηκε και η εξάρτηση των επιφανειακών καταστάσεων από τον τερματισμό της επιφάνειας [233,234]. Το ενδιαφέρον για τα επιφανειακά κύματα αναθερμάνθηκε πρόσφατα, σε σχέση τόσο με την ύπαρξη ‘ψευδοπλάσμων’ (spoof plasmons) σε διάτρητες επιφάνειες τέλειων αγωγών [235,236], όσο και με την πιθανή εμφάνιση εμπροσθοδιαδιδόμενων και οπισθοδιαδιδό-

μενων φωτονικών καταστάσεων Tamm και Shockley [237–239], ενώ προτάθηκε και μεγάλος αριθμός πιθανών εφαρμογών τέτοιων καταστάσεων σε 2Δ και 3Δ φωτονικούς κρυστάλλους. Όταν εμφανίζονται σε διηλεκτρικούς φωτονικούς κρυστάλλους, τα επιφανειακά κύματα μπορούν να θεωρηθούν ως αποτελεσματικοί αντικαταστάτες των επιφανειακών πλασμονίων σε λεπτές μεταλλικές επιφάνειες, λόγω των πολύ μικρότερων απωλειών τους [240,241]. Επιπλέον, επιφανειακές καταστάσεις μπορούν να διεγερθούν χρησιμοποιώντας περιθλαστικές επιφάνειες και να ρυθμιστούν ώστε να ευθυγραμμίζουν το φως που εξέρχεται από έναν κυματοδηγό φωτονικού κρυστάλλου [242–247]. Επιπρόσθετα, οι επιφανειακές καταστάσεις προσελκύουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον στο πεδίο των φωτονικών μεταυλικών, διότι μπορούν να μεταφέρουν τις φθίνουσες συνιστώσες του προσπίπτοντος κύματος στην άλλη πλευρά ενός πλακιδίου που εμφανίζει αρνητική διάθλαση χωρίς απώλειες, διευκολύνοντας τον σχεδιασμό υπερφακών με διακριτική ικανότητα μικρότερη του μήκους κύματος [90,248,249], ενώ μπορούν να ρυθμιστούν ώστε να έχουν αντίθετες ταχύτητες φάσης και ομάδος [250]. Πρόσφατα, οι Ishizaki και Noda παρατήρησαν πειραματικά επιφανειακές καταστάσεις σε 3Δ φωτονικούς κρυστάλλους [251], ανοίγοντας ένα νέο δρόμο για τον χειρισμό των φωτονίων. Τέλος, τέτοιες καταστάσεις αναμένεται να παίζουν σημαντικό ρόλο στην ενίσχυση εκπομπής φθορισμού ενός σημειακού διπόλου κοντά σε φωτονικό κρύσταλλο.

Παρότι οι φωτονικές καταστάσεις σε 2Δ - και σε μικρότερο βαθμό 3Δ - διηλεκτρικούς φωτονικούς κρυστάλλους έχουν μελετηθεί εκτενώς τα τελευταία είκοσι χρόνια, δεν ισχύει το ίδιο για τους μεταλλοδιηλεκτρικούς κρυστάλλους. Οι Zhang *et al.* [193] ανέφεραν ότι τέτοιες καταστάσεις δεν είναι εύκολο να εντοπιστούν σε 2Δ κρυστάλλους μεταλλικών κυλίνδρων, λόγω της απώθησης του HM πεδίου από την επιφάνεια που προκαλεί το μεταλλικό υλικό, αν και δεν απέκλεισαν εντελώς αυτή την πιθανότητα. Μελέτησαν δύο διαφορετικούς μεταλλοδιηλεκτρικούς κρυστάλλους που αποτελούνταν από τετραγωνικά πλέγματα άπειρων σε μήκος κυλίνδρων, είτε αμιγώς μεταλλικών είτε καλυμμένων με ένα διηλεκτρικό στρώμα. Το μέταλλο αντιμετωπίστηκε τόσο ως τέλειος αγωγός όσο και ως υλικό που περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, η οποία παίρνει ισχυρά αρνητικές τιμές στην περιοχή ενδιαφέροντος. Ξεκινώντας από έναν φωτονικό κρύσταλλο διηλεκτρικών κυλίνδρων, που υποστηρίζει επιφανειακές καταστάσεις, προσέθεσαν σταδιακά ολόενα και παχύτερους μεταλλικούς κυλίνδρους στο κέντρο κάθε διηλεκτρικού κυλίνδρου και είδαν ότι οι επιφανειακές καταστάσεις σταδιακά εξαφανίζονται με την αύξηση της ακτίνας του μεταλλικού κυλίνδρου. Συνεπώς, μέχρι πρόσφατα δεν υπήρχε κάποια εργασία που να αναφέρει την ύπαρξη επιφανειακών καταστάσεων σε 3Δ μεταλλοδιηλεκτρικούς φωτονικούς κρυστάλλους. Στο εδάφιο αυτό θα δείξουμε ότι 3Δ κρύσταλλοι μεταλλικών νανοφλοιών υποστηρίζουν τέτοιες καταστάσεις [99]. Είναι αξιοσημείωτο ότι, ενώ συνήθως οι επιφανειακές καταστάσεις εισάγονται είτε τερματίζοντας την επιφάνεια σε κατάλληλο σημείο [224,233] είτε προσθέτοντας μια επιφανειακή ατέλεια [252,253], στην περίπτωση κρυστάλλων μεταλλικών νανοφλοιών που θα εξετάσουμε η επιφάνεια είναι σαφώς ορισμένη, διότι τέτοιοι κρύσταλλοι παρασκευάζονται με μεθόδους αυτοοργάνωσης.

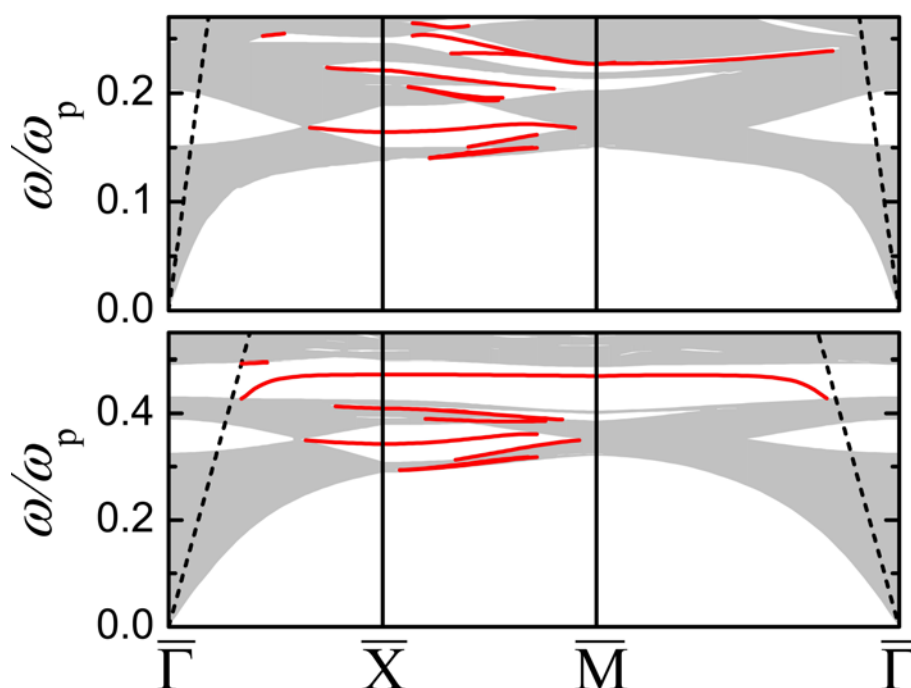
Θα ξεκινήσουμε εξετάζοντας έναν κρύσταλλο fcc μεταλλικών νανοφλοιών ακτίνας $S = c/\omega_p$ και πάχους $C = 0.3c/\omega_p$, το μεταλλικό μέρος των οποίων περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, χωρίς απορρόφηση καταρχάς. Επιλέγουμε πλεγματοειδή σταθερά $a = 2.1\sqrt{2}c/\omega_p$, που αντιστοιχεί σε σφαιρικά σωματίδια σχεδόν σε επαφή. Αναζητούμε επιφανειακές καταστάσεις εντοπισμένες στις επιφάνειες (001) και (111) του κρυστάλλου. Συνεπώς, στα πλαίσια της μεθόδου LMS, χρειάζεται να οικοδομήσουμε τον κρύσταλλο με δύο



Σχήμα 4.12: Φωτονική δομή ζωνών (αριστερά διαγράμματα) ενός κρυστάλλου fcc ($a_0 = 2.1c/\omega_p$) μεταλλικών νανοφλοιών με $S = c/\omega_p$ και $C = 0.3c/\omega_p$, κατά μήκος της διεύθυνσης ΓX (πάνω) και της διεύθυνσης ΓL (κάτω), και η προβολή της στην EZB της επιφάνειας (001) (πάνω) και (111) κάτω, κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας του Σχ. 2.6. Οι σκιασμένες και λευκές περιοχές συμβολίζουν καταστάσεις και χάσματα, αντίστοιχα. Οι κόκκινες γραμμές στα χάσματα παριστούν τις επιφανειακές καταστάσεις, ενώ οι μαύρες διακεκομμένες γραμμές τον κώνο φωτός στον αέρα.

διαφορετικούς τρόπους: ως επαλληλία διαδοχικών επιπέδων (001) και (111), με απόσταση πλησιέστερων γειτόνων $a_0 = 2.1c/\omega_p$. Τα διαδοχικά επίπεδα (001) και (111) χωρίζονται από απόσταση $d = a/2$ και $d = a\sqrt{3}/3$, αντίστοιχα.

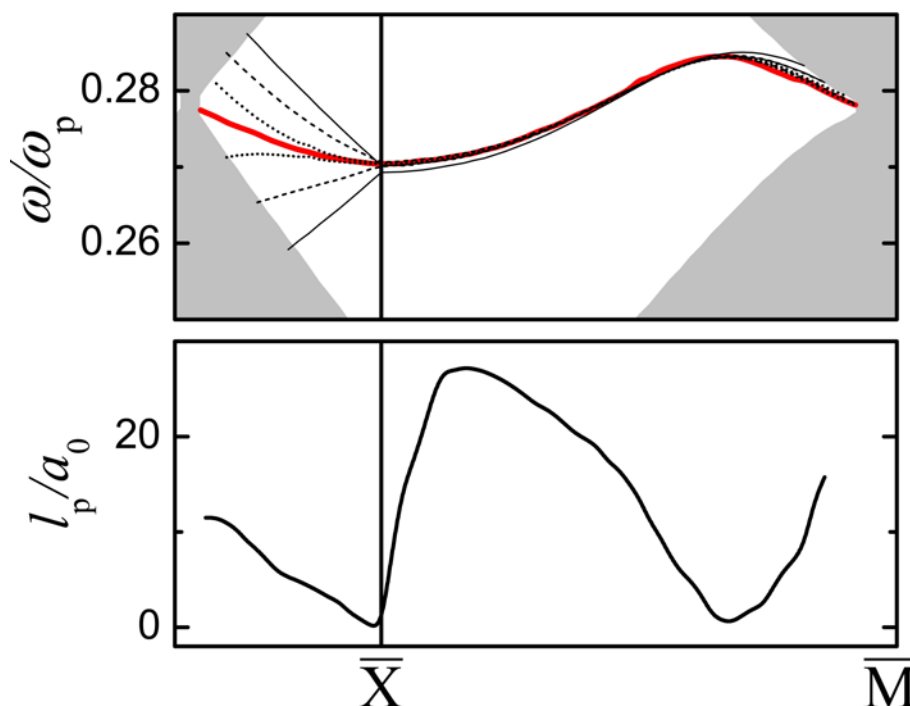
Στα αριστερά διαγράμματα του Σχ. 4.12 δείχνουμε τη φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κατά μήκος των διευθύνσεων ΓX και ΓL (βλ. Σχ. 2.6). Οι γραμμικές, διπλά εκφυλισμένες ζώνες που παίρνουμε σε χαμηλές συχνότητες αλληλεπιδρούν με τις επίπεδες ζώνες που προέρχονται από τις διπολικές και τετραπολικές πλασμαονικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου των μεμονωμένων νανοφλοιών, στις θέσεις $\sim 0.3\omega_p$ και $\sim 0.4\omega_p$, αντίστοιχα, και ως αποτέλεσμα ανοίγουν χάσματα υβριδισμού. Δίπλα στα διαγράμματα ζωνών δείχνουμε τις προβολές της φωτονικής δομής ζωνών στην EZB της αντίστοιχης επιφάνειας κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας του Σχ. 2.6. Κατά τα συνήθη, οι σκιασμένες περιοχές αντιπροσωπεύουν διαδιδόμενες καταστάσεις του HM πεδίου, ενώ οι λευκές χάσματα. Με κόκκινες συνεχείς γραμμές μέσα στα χάσματα δείχνουμε τις σχέσεις διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων, ενώ οι μαύρες διακεκομμένες γραμμές παριστούν τον κώνο φωτός στον αέρα. Αυτές οι καταστάσεις, που προέρχονται από φαινόμενα συμβολής στον φωτονικό κρύσταλλο [193, 224], βρίσκονται



Σχήμα 4.13: Προβολή της φωτονικής δομής ζωνών κρυστάλλων fcc ($a_0 = 2.1c/\omega_p$) από ομοιογενείς μεταλλικές σφαίρες ακτίνας $S = c/\omega_p$ (πάνω διάγραμμα) και από μεταλλικούς νανοφλοιούς ακτίνας $S = c/\omega_p$ και πάχους $C = 0.1c/\omega_p$ (κάτω διάγραμμα) στην EZB της (001) επιφάνειάς τους, κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας που φαίνονται στο Σχ. 2.6. Οι σκιασμένες και λευκές περιοχές συμβολίζουν καταστάσεις και χάσματα, αντίστοιχα. Οι κόκκινες γραμμές στα χάσματα παριστούν τις επιφανειακές καταστάσεις, ενώ οι μαύρες διακεκομμένες γραμμές τον κώνο φωτός στον αέρα.

έξω από τον κώνο φωτός, και μέσα σε χάσμα του φωτονικού κρυστάλλου, είναι δηλαδή πραγματικές επιφανειακές καταστάσεις που φθίνουν εκθετικά τόσο στον κρύσταλλο όσο και στον αέρα. Παρουσιάζει ενδιαφέρον το γεγονός ότι σε κάποιες από τις καμπύλες διασποράς παρατηρούμε τμήματα με αρνητική κλίση, που μπορούν να συσχετιστούν με οπισθοδιαδιδόμενα επιφανειακά κύματα, με αντίθετες ταχύτητες φάσης και ομάδος [250].

Κατά μήκος διευθύνσεων υψηλής συμμετρίας της EZB που σχετίζεται με την επιφάνεια (001) οι επιφανειακές καταστάσεις μπορούν να χαρακτηριστούν ως άρτιες ή περιττές ως προς ανάκλαση σε σχέση με κατάλληλο κάθετο επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας. Για παράδειγμα, κατά μήκος της διεύθυνσης $\overline{\Gamma X}$ οι καταστάσεις γύρω από τη συχνότητα $0.28\omega_p$ είναι άρτιες, ενώ αυτές γύρω από τις συχνότητες $0.35\omega_p$ και $0.42\omega_p$ είναι περιττές ως προς την ανάκλαση ως προς το επίπεδο $x-z$. Όμοια, κατά μήκος της διεύθυνσης $\overline{\Gamma M}$ οι καταστάσεις γύρω από τη συχνότητα $0.35\omega_p$ είναι άρτιες ως προς την ανάκλαση ως προς το αντίστοιχο κάθετο επίπεδο. Κατά μήκος άλλων διευθύνσεων της EZB της επιφάνειας (001), όπως και για κάθε διεύθυνση της EZB της επιφάνειας (111), δεν υπάρχουν τέτοια επίπεδα κατοπτρικής συμμετρίας και ένας χαρακτηρισμός των επιφανειακών καταστάσεων με βάση τη συμμετρία δεν είναι εφικτός.



Σχήμα 4.14: Πάνω διάγραμμα: Μεγέθυνση του πάνω διαγράμματος του Σχ. 4.12 στην περιοχή της ζώνης '1', και οι σχέσεις διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων πεπερασμένων πλακιδίων του υπό εξέταση κρυστάλλου, αποτελούμενων από δύο, τέσσερα, και οκτώ επίπεδα νανοφλοιών (λεπτές συνεχείς, διακεκομμένες, και εστιγμένες γραμμές, αντίστοιχα), υπολογισμένες με την Εξ. (2.117). Κάτω διάγραμμα: Το μήκος διάδοσης των επιφανειακών καταστάσεων του πάνω διαγράμματος.

Προκειμένου να εξετάσουμε τη δυνατότητα ρύθμισης αυτών των επιφανειακών καταστάσεων στη συχνότητα πραγματοποιήσαμε συστηματικούς υπολογισμούς μεταβάλλοντας το πάχος του φλοιού των μεμονωμένων σκεδαστών, κρατώντας τη συνολική τους ακτίνα και την απόσταση πλησιέστερων γειτόνων σταθερές. Στο Σχ. 4.13 παρουσιάζουμε την προβολή της φωτονικής δομής ζωνών στην EZB της επιφάνειας (001), και τις αντίστοιχες επιφανειακές καταστάσεις, για τις οριακές περιπτώσεις πολύ λεπτών μεταλλικών νανοφλοιών με $C = 0.1c/\omega_p$ (και $S_1 = 0.9c/\omega_p$), και ομοιογενών μεταλλικών σφαιρών με ακτίνα $S = c/\omega_p$. Η μεταβολή του πάχους των φλοιών έχει ως βασικό αποτέλεσμα τη μετατόπιση των πλασμονικών καταστάσεων, και των χασμάτων που προέρχονται από αυτές, στη συχνότητα [97]. Για παράδειγμα, η θέση της ζώνης '1' του Σχ. 4.12 κυμαίνεται από $\sim 0.15\omega_p$ για τον κρύσταλλο λεπτών νανοφλοιών μέχρι $\sim 0.35\omega_p$ για τον κρύσταλλο των ομοιογενών μεταλλικών σφαιρών. Παρουσιάζει ενδιαφέρον το γεγονός ότι, ενώ τα επιμέρους χάσματα που σχετίζονται με τις διπολικές πλασμονικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου διατηρούν την ίδια μορφή και το μέγιστο εύρος τους αυξάνεται μόνο κατά 25%, τα χάσματα που σχετίζονται με τις τετραπολικές πλασμονικές κα-

ταστάσεις τύπου σωματιδίου διευρύνονται δραστικά σε όλη την έκταση της EZB καθώς το πάχος του μεταλλικού φλοιού μεγαλώνει, μέχρι που σχηματίζεται ένα απόλυτο χάσμα. Αξίζει επίσης να αναφερθεί ότι, σε αντίθεση με την αναφορά [193], όπου οι επιφανειακές καταστάσεις παρατηρούνται μόνο όταν το μεταλλικό υλικό του φωτονικού κρυστάλλου είναι καλυμμένο από ένα διηλεκτρικό στρώμα, στην περίπτωση μας οι επιφανειακές καταστάσεις επιζούν ακόμα και για κρυστάλλους ομοιογενών μεταλλικών σφαιρών. Η παρουσία του μεταλλικού υλικού δεν αποκλείει την εμφάνιση επιφανειακών καταστάσεων σε έναν φωτονικό κρύσταλλο, υπό την προϋπόθεση ότι η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου δεν παίρνει ισχυρά αρνητικές τιμές στη σχετική περιοχή συχνοτήτων. Επιπλέον, οι υπολογισμοί μας έδειξαν ότι η γεωμετρία του κρυστάλλου είναι επίσης ιδιαίτερα σημαντικός παράγοντας: για παράδειγμα, οι επιφανειακές καταστάσεις σταδιακά χάνονται καθώς αυξάνουμε την πλεγματοτική σταθερά, δηλαδή καθώς μειώνουμε τον όγκο κατάληψης των νανοφλοιών.

Οι σχέσεις διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων στα σχήματα 4.12 και 4.13 υπολογίστηκαν για τον ημιάπειρο κρύσταλλο, σύμφωνα με την Εξ. (2.133). Μπορούμε όμως να τις υπολογίσουμε και με βάση την Εξ. (2.117), θεωρώντας βέβαια πεπερασμένα πλακίδια του κρυστάλλου, μια μέθοδος που έχει ήδη χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη επιφανειακών καταστάσεων σε φωνονικούς κρυστάλλους [254]. Προφανώς, για ένα πεπερασμένο πλακίδιο παίρνουμε δύο καμπύλες διασποράς, κοντά μεταξύ τους σε συχνότητα, που αντιστοιχούν σε επιφανειακές καταστάσεις εντοπισμένες στις δύο επιφάνειες του πλακιδίου. Καθώς ο αριθμός των επιπέδων που συνιστούν το πλακίδιο αυξάνεται, η αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο αυτών καταστάσεων γίνεται ασθενέστερη και τα αποτελέσματα συγκλίνουν στην καμπύλη που χαρακτηρίζει τον ημιάπειρο κρύσταλλο. Αυτό φαίνεται στο Σχ. 4.14 για τη ζώνη '1' του Σχ. 4.12, για πλακίδια αποτελούμενα από δύο, τέσσερα, και οκτώ επίπεδα (001) νανοφλοιών. Έχει ενδιαφέρον ότι η σύγκλιση είναι ταχύτερη κατά μήκος της διεύθυνσης $\bar{X}\bar{M}$, γεγονός που δείχνει ότι σε αυτή την περίπτωση οι επιφανειακές καταστάσεις είναι περισσότερο εντοπισμένες, όπως επιβεβαιώνουμε υπολογίζοντας το αντίστοιχο βάθος διείσδυσης.

Οι απώλειες λόγω απορρόφησης, τις οποίες μέχρι τώρα αγνοήσαμε, λαμβάνονται υπόψη θέτοντας $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$ στην Εξ. (3.1). Τότε η Εξ. (2.133) ικανοποιείται στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο της συχνότητας, για $\omega - i\gamma$, όπου $\gamma > 0$ είναι ο αντίστροφος χρόνος ζωής της κατάστασης. Οι χρόνοι ζωής, πολλαπλασιασμένοι επί την αντίστοιχη ταχύτητα ομάδος, $v_g = d\omega/dk$, κατά μήκος μιας δεδομένης διεύθυνσης, παρέχουν το μήκος διάδοσης, l_p , της κατάστασης. Στο Σχ.4.14 δείχνουμε το μήκος διάδοσης για τη ζώνη '1' του Σχ. 4.12. Είναι φανερό ότι, ακόμα και για αυτή την αρκετά επίπεδη ζώνη, το μήκος διάδοσης που προκύπτει μπορεί να είναι μέχρι και $25a_0$. Παρόμοιοι υπολογισμοί για πιο εκτεταμένες ζώνες επιφανειακών καταστάσεων δίνουν μήκη διάδοσης μέχρι και $80a_0$, γεγονός που καθιστά αυτές τις καταστάσεις ενδιαφέρουσες σε σχέση με εφαρμογές μεταφοράς φωτονίων. Αυτά τα μήκη διάδοσης είναι της τάξης μερικών μικρομέτρων, τη στιγμή που για τα επιφανειακά πλασμόνια σε μια επίπεδη επιφάνεια αργύρου το μήκος διάδοσης κυμαίνεται από $10 - 100\mu\text{m}$ στο ορατό, και αυξάνεται μέχρι το 1mm καθώς πλησιάζουμε την περιοχή τηλεπικοινωνιών στα $1.5\mu\text{m}$ [255].

Κεφάλαιο 5

Περιοδικές δομές μεταλλικών νανοκυλίνδρων

Η οπτική απόκριση μεταλλικών νανοκυλίνδρων πεπερασμένου (συγκρίσιμου με τη διάμετρο της διατομής τους) ύψους έχει μελετηθεί εκτενώς τα τελευταία χρόνια λόγω των μοναδικών ιδιοτήτων τους, που προέρχονται από τη διέγερση πλασματικών καταστάσεων διαφόρων τύπων. Λόγω του κυλινδρικού τους σχήματος, ο τριπλός εκφυλισμός της κύριας διπολικής πλασματικής κατάστασης σε ένα αντίστοιχο σφαιρικό σωματίδιο (βλ. Κεφ. 4) αίρεται και μπορούν να παρατηρηθούν καταστάσεις που σχετίζονται με ταλαντώσεις ελεύθερων ηλεκτρονίων είτε κατά μήκος είτε κάθετα στον άξονα του νανοκυλίνδρου [256–258]. Οι καταστάσεις αυτές μπορούν εύκολα να ρυθμιστούν σε ένα μεγάλο εύρος συχνοτήτων, μεταβάλλοντας τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά ή το διηλεκτρικό περιβάλλον των μεταλλικών νανοκυλίνδρων, ή και το ίδιο το μεταλλικό υλικό [259–263]. Τα πράγματα γίνονται ακόμα πιο ενδιαφέροντα όταν αυτά τα σωματίδια πλησιάζουν μεταξύ τους και αλληλεπιδρούν. Ο πλασματικός υβριδισμός οδηγεί σε πολύ πλουσιότερα φάσματα για ζεύγη ή μικρές συλλογές νανοκυλίνδρων [264–267], ενώ η διάταξή τους σε περιοδικά πλέγματα προσφέρει τη δυνατότητα συνδυασμού των πλασματικών καταστάσεων των μεμονωμένων σωματιδίων με ελεγχόμενη αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματιδίων [268–270]. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν πλέγματα στα οποία οι άξονες των νανοκυλίνδρων είναι παράλληλοι, κάθετα σε ένα υπόστρωμα, διότι τέτοιες δομές κατασκευάζονται εύκολα με χημικές ή λιθογραφικές μεθόδους [271–275] και βρίσκουν πολυάριθμες εφαρμογές. Για παράδειγμα, τέτοια πλέγματα προκαλούν σημαντική ενίσχυση του ΗΜ πεδίου και χρησιμοποιούνται ως υποστρώματα για επιφανειακή ενίσχυση της σκέδασης Raman [276]. Επιπλέον, σε σύγκριση με τους μεμονωμένους μεταλλικούς νανοκυλίνδρους, τα πλέγματα είναι πιο ευαίσθητα στις αλλαγές του δείκτη διάθλασης του περιβάλλοντος και άρα ιδιαίτερα χρήσιμα ως βιοαισθητήρες [277]. Όταν οι νανοκύλινδροι του πλέγματος πλησιάζουν μεταξύ τους, το ΗΜ πεδίο συγκεντρώνεται στη διηλεκτρική ενδοπλεγματική περιοχή [272, 278], στην οποία σχηματίζονται διαμήκη στάσιμα κύματα [279] κατ’ αναλογία με τις πλασματικές κοιλότητες συντονισμού. Εκμεταλλευόμενος την ισχυρή ανισοτροπία τους, μπορεί κανείς να σχεδιάσει φίλτρα πολώσεων [280], ενώ υπό συγκεκριμένες προϋποθέσεις η ανισοτροπία οδηγεί σε αρνητική διάθλαση ή αυτοεπιθυστάση [101, 133, 152, 281]. Η χρήση πλεγμάτων νανοκυλίνδρων επιτρέπει εξάλλου τον σχεδιασμό υπερφασμάτων, διότι τα πλασμόνια μεταδίδονται μέσω των μεταλλικών σωματιδίων, μεταφέροντας την ενέργεια κατά μήκος των νανοκυλίνδρων, σε αρκετά μεγάλες αποστάσεις, και συζεύγνυνται με συμβατικές οπτικές διατάξεις παράγοντας την εικόνα [63]. Στα πλαίσια αυτής της ιδέας προτάθηκε ότι 3Δ κρύσταλλοι μεταλλικών νανοκυλίνδρων μπορούν να προσφέρουν μεγάλα μήκη διάδοσης και λειτουργία σε ευρεία περιοχή συχνοτήτων,

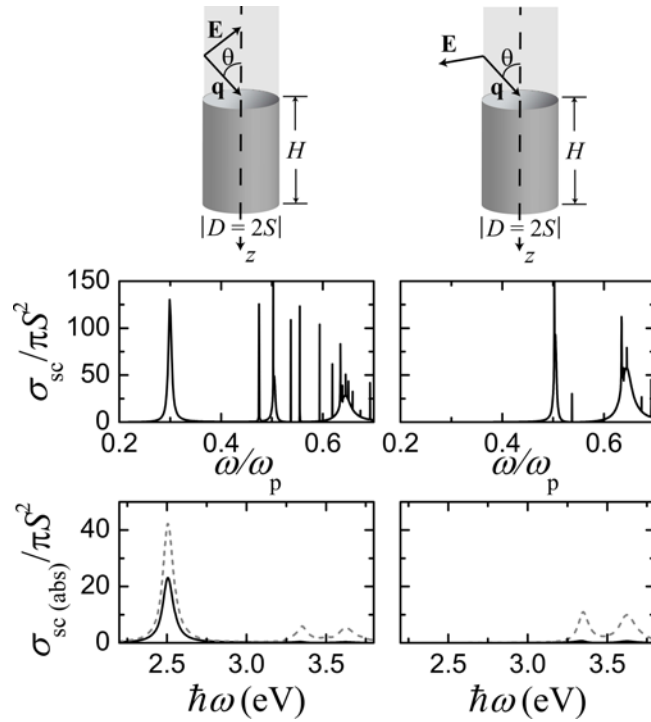
δίνοντας έτσι τη δυνατότητα σχεδιασμού φακών με διακριτική ικανότητα μικρότερη του μήκους κύματος και έγχρωμη απεικόνιση [65].

Στο παρόν κεφάλαιο θα εξετάσουμε την οπτική απόκριση περιοδικών δομών μεταλλικών νανοκυλίνδρων. Ξεκινάμε παρουσιάζοντας μια συστηματική μελέτη, βασισμένη στη θεωρία ομάδων, όλων των πλασμονικών καταστάσεων σε έναν μεμονωμένο νανοκύλινδρο. Στη συνέχεια διατάσσουμε τέτοιους νανοκυλίνδρους σε 2Δ πλέγματα και δείχνουμε ότι οι θέσεις των πλασμονικών καταστάσεων των πλεγμάτων εξαρτώνται από ένα πλήθος παραμέτρων, όπως είναι το ύψος του κυλίνδρου και η πλεγματική σταθερά, προσφέροντας με αυτό τον τρόπο τη δυνατότητα ρύθμισης των πλασμονικών καταστάσεων σε μια ευρεία περιοχή που καλύπτει όλο το ορατό και το εγγύς υπέρυθρο [270]. Εξάλλου, οι καταστάσεις συντονισμού και οι ιδιοκαταστάσεις τέτοιων πλεγμάτων μπορούν να αξιοποιηθούν για την ενίσχυση της εκπομπής φθορισμού ενός ενεργού κέντρου. Ακολούθως μελετάμε τη φωτονική δομή ζωνών ενός εξαγωνικού κρυστάλλου και τη δυνατότητα ομοιογενοποίησής του με μια απλουστευμένη εκδοχή της μεθόδου του Εδ. 3.4. Οι επιφάνειες σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου δείχνουν ότι ο κρύσταλλος αυτός παρουσιάζει εντυπωσιακές διαθλαστικές ιδιότητες [101]. Τέλος, εξετάζουμε τις ιδιότητες κυματοδηγού γραμμικών περιοδικών αλυσίδων τέτοιων νανοκυλίνδρων, υπολογίζοντας σχετικά διαγράμματα διασποράς, τόσο με τη μέθοδο LMS όσο και με το ευρέως χρησιμοποιούμενο μοντέλο συζευγμένων διπόλων, και εξάγουμε συμπεράσματα για τα όρια ακρίβειας του τελευταίου.

5.1 Σκέδαση από μεμονωμένο νανοκύλινδρο

Οι οπτικές ιδιότητες μεμονωμένων μεταλλικών νανοκυλίνδρων έχουν μελετηθεί από αρκετές ερευνητικές ομάδες [261, 262, 282–284]. Ένα σημαντικό συμπέρασμα είναι ότι αυτό που κατά κύριο λόγο καθορίζει το μήκος κύματος συντονισμού είναι ο λόγος διαμέτρου/ύψους (D/H), και ότι μεταβάλλοντας αυτό τον λόγο μπορεί κανείς να μετατοπίσει τους διπολικούς πλασμονικούς συντονισμούς σε όλο το ορατό φάσμα. Το μήκος κύματος του κυρίαρχου διαμήκους (συσχετισμένου με ταλαντώσεις ελεύθερων ηλεκτρονίων κατά μήκος του άξονα του κυλίνδρου) συντονισμού ενός μεμονωμένου νανοκυλίνδρου αυξάνεται σχεδόν γραμμικά με τον λόγο διαμέτρου/ύψους του σωματιδίου. Είναι ενδιαφέρον ότι ο συντονισμός αυτός εμφανίζεται σε μήκη κύματος πολύ μεγαλύτερα από αυτά μιας ιδανικής διπολικής κεραίας μισού μήκους κύματος ($H = \lambda/2$). Αυτό εξηγείται ως εξής: Στις οπτικές συχνότητες ο απλός νόμος κλιμάκωσης του μήκους κύματος, $H = \lambda/2$, καταρρέει, διότι η προσπίπτουσα ακτινοβολία δεν υφίσταται πλέον τέλεια ανάκλαση από τη μεταλλική επιφάνεια. Αντίθετα, το πεδίο διεισδύει μέσα στο μέταλλο, διεγείροντας επιφανειακές πλασμονικές ταλαντώσεις. Συνεπώς, στις οπτικές συχνότητες μια κεραία δεν ανταποκρίνεται στο εξωτερικό μήκος κύματος, λ , αλλά σε ένα ενεργό μήκος κύματος, λ_{eff} , το οποίο εξαρτάται από τις ιδιότητες του υλικού [285]. Η διατύπωση τέτοιων νόμων κλιμάκωσης σε πλασμονικά συστήματα έχει προσελκύσει μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια [267, 286]. Οι περισσότερες μελέτες έχουν επικεντρωθεί στους διπολικούς συντονισμούς, ενώ τα ανώτερης τάξης πολύπολα έχουν προσελκύσει σαφώς λιγότερο ενδιαφέρον [258, 262, 270]. Στο εδάφιο αυτό θα παρουσιάσουμε μια πλήρη και εμπεριστατωμένη μελέτη όλων των πλασμονικών συντονισμών των νανοκυλίνδρων, βασισμένη στη θεωρία ομάδων.

Εν γένει, ένα μεμονωμένο σωματίδιο υποστηρίζει καταστάσεις συντονισμού του ΗΜ πεδίου στις θέσεις των πόλων των ιδιοτιμών του πίνακα σκέδασης στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο



Σχήμα 5.1: Ενεργός διατομή σκέδασης (μαύρες συνεχείς γραμμές) και απορρόφησης (γκρι διακεκομμένες γραμμές) για έναν μεταλλικό νανοκύλινδρο στον αέρα, για TM (αριστερά διαγράμματα) και TE (δεξιά διαγράμματα) πολωμένο φως που προσπίπτει με γωνία $\theta = 45^\circ$ ως προς τον άξονα του κυλίνδρου, όπως φαίνεται στις σχηματικές απεικονίσεις. Στα πάνω διαγράμματα ο νανοκύλινδρος, διαμέτρου $D = 2S = c/\omega_p$ και ύψους $H = 2.5c/\omega_p$, περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), με $\tau^{-1} = 0$, που σημαίνει ότι η ενεργός διατομή απορρόφησης είναι μηδενική. Στα κάτω διαγράμματα χρησιμοποιούνται οι πειραματικές τιμές για τη διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου [199] για έναν νανοκύλινδρο με διάμετρο 20nm και ύψος 50nm.

της συχνότητας και κοντά στον πραγματικό άξονα. Για μη σφαιρικούς σχεδαστές, ο πίνακας σκέδασης είναι μη διαγώνιος στη βάση σφαιρικών κυμάτων και κατά συνέπεια δεν είναι δυνατό να κατατάξει κανείς τις ιδιοτιμές του με βάση την πόλωση και τον δείκτη της στροφορμής. Παρότι οι πλασματικές καταστάσεις έχουν συνήθως μια κυρίαρχη πόλωση και έναν 2^ℓ -πολικό χαρακτήρα [262], ακριβής τέτοιος χαρακτηρισμός μπορεί να γίνει μόνο με βάση τη θεωρία ομάδων [287]. Οι διάφορες καταστάσεις έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της κατάλληλης σημειακής ομάδας, που στην περίπτωση σωματιδίων με κυλινδρική συμμετρία είναι η $D_{\infty h}$ [114]. Μια δεδομένη κατάσταση διεγείρεται μόνο αν το ηλεκτρικό πεδίο του προσπίπτοντος φωτός έχει μη μηδενική προβολή στον κατάλληλο μη αναγωγίσιμο υπόχωρο. Για παράδειγμα, ένα επίπεδο ΗΜ κύμα που προσπίπτει υπό γωνία θ ($0 < \theta < \pi/2$) ως προς τον άξονα του νανοκύλινδρου (τον οποίο παίρνουμε κατά τη διεύθυνση z) μπορεί να διεγείρει καταστάσεις συμμετρίας $A_{1u}, A_{2g}, E_{|m|g}, E_{|m|u} \forall m$ αν είναι πολωμένο κάθετα στον

άξονα του σωματιδίου (πόλωση TE), και καταστάσεις συμμετρίας $A_{1g}, A_{2u}, E_{|m|g}, E_{|m|u} \forall m$ αν είναι πολωμένο στο επίπεδο πρόσπτωσης, που ορίζεται από τον άξονα του σωματιδίου και το κυματόνισμα (πόλωση TM).

Ιδιοσυχνότητα (σε μονάδες ω_p)	Συμμετρία	Κυρίαρχος χαρακτήρας
* 0.2989	A_{2u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.4747	A_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.5024	E_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο/16-πολο
* 0.5044	E_{1u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.5377	E_{2g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.5546	A_{2u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.5936	A_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.6187	A_{2u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.6345	E_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο/16-πολο
0.6377	A_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.6385	E_{1u}	Ηλεκτρικό δίπολο/οκτάπολο/32-πολο
* 0.6439	E_{1u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.6449	E_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο/16-πολο
0.6501	A_{2u}	Ηλεκτρικό δίπολο
0.6585	A_{1g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.6737	E_{2g}	Ηλεκτρικό τετράπολο
0.6927	E_{2g}	Ηλεκτρικό τετράπολο

Πίνακας 5.1: Πλασμονικές καταστάσεις ενός μεμονωμένου μεταλλικού νανοκύλινδρου ($D = c/\omega_p$, $H = 2.5c/\omega_p$), που περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude χωρίς απορρόφηση, στον αέρα. Ο αστερίσκος δηλώνει τις καταστάσεις με σχετικά μικρό χρόνο ζωής, δηλαδή τους ευρύτερους συντονισμούς [270].

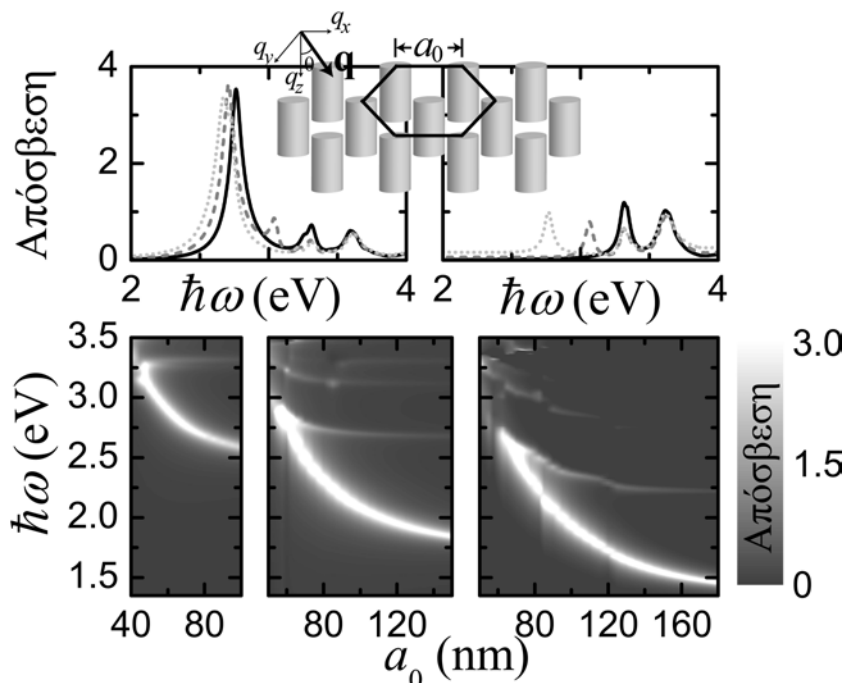
Στο Σχ. 5.1 παρουσιάζουμε τις ενεργές διατομές σκέδασης και απορρόφησης, κανονικοποιημένες στη γεωμετρική διατομή, για έναν μεμονωμένο μεταλλικό νανοκύλινδρο στον αέρα. Στα πάνω διαγράμματα ο κύλινδρος περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), χωρίς απορρόφηση ($\tau^{-1} = 0$), και έχει διάμετρο $D \equiv 2S = c/\omega_p$ και ύψος $H = 2.5c/\omega_p$. Στην περίπτωση αυτή προφανώς η ενεργός διατομή απορρόφησης μηδενίζεται ταυτοτικά. Ένα εισερχόμενο κύμα πόλωσης TM ή TE προσπίπτει υπό γωνία $\theta = 45^\circ$ ως προς τον άξονα του κυλίνδρου και διεγείρει μεγάλο αριθμό σωματιδιακών πλασμονικών καταστάσεων, όπως φαίνεται στο σχήμα. Οι ιδιοσυχνότητες, η συμμετρία και ο κυρίαρχος χαρακτήρας των καταστάσεων αυτών παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.1. Η πλασμονική κατάσταση που θα μας απασχολήσει κατά κύριο λόγο στα επόμενα εδάφια είναι η κατάσταση συμμετρίας A_{2u} στη συχνότητα $0.2989\omega_p$. Η κατάσταση αυτή έχει κυρίαρχο ηλεκτρικό διπολικό χαρακτήρα και μπορεί να περιγραφεί, σε μια απλοποιημένη εικόνα, ως κατάσταση που προέρχεται από ταλαντώσεις των ελεύθερων ηλεκτρονίων κατά μήκος του άξονα του νανοκύλινδρου. Γι' αυτό συχνά θα την αναφέρουμε ως τη (θεμελιώδη) διαμήκη πλασμονική κατάσταση. Στα κάτω διαγράμματα του Σχ. 5.1 δείχνουμε αντίστοιχα αποτελέσματα για έναν πραγματικό νανοκύλινδρο από άργυρο,

με διαστάσεις $D = 20\text{nm}$ και $H = 50\text{nm}$, στον αέρα. Για τη διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου χρησιμοποιούμε τις πειραματικές τιμές των Johnson και Christy [199], που λαμβάνουν υπόψη τις απώλειες λόγω απορρόφησης. Είναι φανερό ότι, στην περιοχή που μας ενδιαφέρει, μόνο οι διπολικού τύπου καταστάσεις μικρότερου χρόνου ζωής επιβιώνουν και εμφανίζονται στις ενεργές διατομές σκέδασης/απορρόφησης. Οι καταστάσεις σωματιδιακών πλασμονίων με χρόνο ζωής μεγαλύτερο από τον χρόνο αποκατάστασης των ελεύθερων ηλεκτρονίων στο μέταλλο χάνονται λόγω της απορρόφησης.

5.2 Διδιάστατα πλέγματα νανοκυλίνδρων

Θεωρούμε ένα εξαγωνικό επίπεδο, με πλεγματική σταθερά $a_0 = 70\text{nm}$, νανοκυλίνδρων από άργυρο, διαμέτρου $D = 20\text{nm}$ και ύψους $H = 50\text{nm}$, στο οποίο προσπίπτει TM πολωμένο φως υπό γωνία $\theta = 45^\circ$, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 5.2. Αρχικά θεωρούμε ότι οι νανοκύλινδροι βρίσκονται στον αέρα, χωρίς υπόστρωμα. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των πλασμονικών καταστάσεων των μεμονωμένων νανοκυλίνδρων δημιουργεί συλλογικές πλασμονικές καταστάσεις του επιπέδου, οι οποίες εκδηλώνονται ως κορυφές στο φάσμα απόσβεσης. Σε κάθετη πρόσπτωση, ή σε πρόσπτωση TE πολωμένου φωτός υπό γωνία, η θεμελιώδης διαμήκης κατάσταση προφανώς δεν διεγείρεται, διότι σε αυτές τις περιπτώσεις το ηλεκτρικό πεδίο του προσπίπτοντος κύματος ταλαντώνεται κάθετα στον άξονα των νανοκυλίνδρων. Αντίθετα, ένα TM πολωμένο, προσπίπτον υπό γωνία κύμα διεγείρει τόσο εγκάρσιες όσο και διαμήχεις συλλογικές καταστάσεις. Η κυριότερη κορυφή στο φάσμα απόσβεσης αντιστοιχεί στις θεμελιώδεις διπολικού χαρακτήρα διαμήχεις καταστάσεις, όπως φαίνεται με μαύρες συνεχείς γραμμές στο Σχ. 5.2. Οι εγκάρσιες διπολικές καταστάσεις, καθώς και καταστάσεις που αντιστοιχούν σε ανώτερης τάξης πολύπολα, εμφανίζονται ως μικρότερες κορυφές σε υψηλότερες συχνότητες. Η θέση της θεμελιώδους διαμήχους κορυφής εξαρτάται σημαντικά από τον λόγο διαμέτρου/ύψους των νανοκυλίνδρων και από τη μεταξύ τους απόσταση. Προκειμένου να εξετάσουμε την εξάρτηση αυτή, παρουσιάζουμε στο κάτω μέρος του Σχ. 5.2 φάσματα απόσβεσης για TM πολωμένο φως, προσπίπτον υπό γωνία $\theta = 45^\circ$ σε πλέγματα νανοκυλίνδρων ύψους $H = 50, 100, \text{ και } 150\text{nm}$, με μεταβλητή πλεγματική σταθερά. Στα δεξιά άκρα των τριών διαγραμμάτων, δηλαδή για μεγάλη πλεγματική σταθερά, η οπτική απόκριση των πλεγμάτων είναι παρόμοια με αυτή των αντίστοιχων μεμονωμένων νανοκυλίνδρων, και ο διπολικός διαμήχους συντονισμός μετατοπίζεται ταχύτατα προς χαμηλότερες συχνότητες αυξάνοντας το ύψος του νανοκυλίνδρου. Καθώς η πλεγματική σταθερά μειώνεται και οι νανοκύλινδροι πλησιάζουν μεταξύ τους, η αλληλεπίδρασή τους οδηγεί σε σημαντική μετατόπιση του διαμήχους διπολικού συντονισμού σε μεγαλύτερες συχνότητες, ενώ οι θέσεις των υπόλοιπων συντονισμών δεν επηρεάζονται σημαντικά. Για πολύ μικρές πλεγματικές σταθερές οι διαμήχεις και εγκάρσιοι συντονισμοί εμφανίζονται στις ίδιες συχνότητες και δεν μπορεί να αποδοθεί σαφής χαρακτήρας στις συλλογικές πλασμονικές διεγέρσεις. Είναι εντυπωσιακό ότι η θέση της θεμελιώδους διαμήχους διπολικής πλασμονικής κατάστασης μπορεί να ρυθμιστεί σε ένα μεγάλο εύρος συχνοτήτων, που εκτείνεται από το υπέρυθρο ως το υπεριώδες, καλύπτοντας όλο το ορατό φάσμα, μεταβάλλοντας απλά τις γεωμετρικές παραμέτρους, με τους πιο ψηλούς νανοκυλίνδρους να προσφέρουν μεγαλύτερες δυνατότητες ρύθμισης της συχνότητας. Εν γένει, ψηλότεροι νανοκύλινδροι, οι οποίοι παρασκευάζονται με εναπόθεση μετάλλου σε πορώδη υποστρώματα οξειδίου του αργιλίου (Al_2O_3) και έχουν μελετηθεί θεωρητικά και πειραματικά [278,280], παρουσιάζουν πλουσιότερα

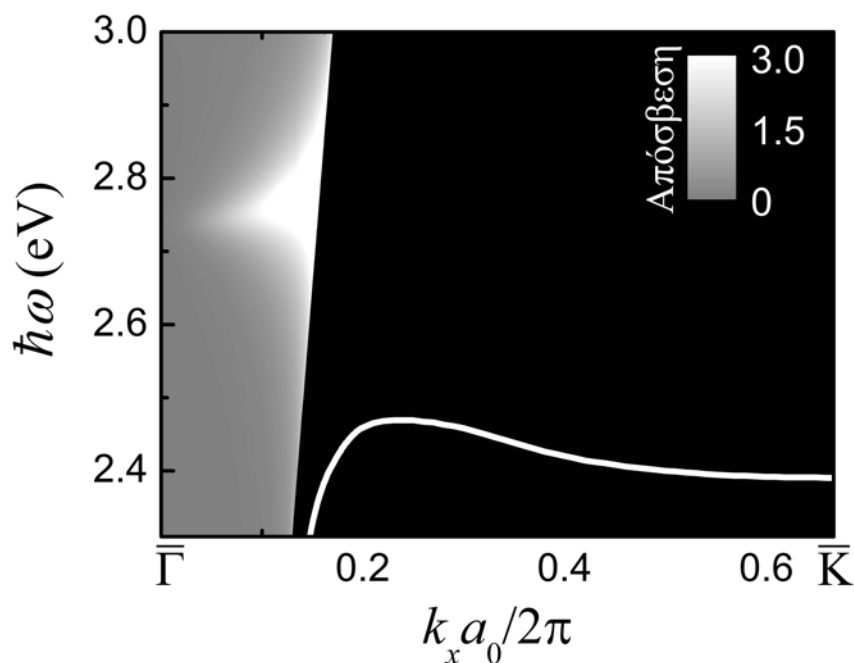
φάσματα με περισσότερες κορυφές πλασμαονικών καταστάσεων.



Σχήμα 5.2: Πάνω διάγραμμα: Φάσματα απόσβεσης για εξαγωνικά πλέγματα ($a_0 = 70\text{nm}$) νανοκυλίνδρων από άργυρο ($D = 20\text{nm}$, $H = 50\text{nm}$), όπως φαίνονται σχηματικά στο ένθετο, για TM (αριστερά διαγράμματα) και TE (δεξιά διαγράμματα) πολωμένο φως που προσπίπτει υπό γωνία $\theta = 45^\circ$. Οι μαύρες συνεχείς, γκρι διακεκομμένες, και ανοιχτές γκρι εστιγμένες γραμμές αντιστοιχούν σε πλέγματα στον αέρα, σε υπόστρωμα SiO_2 , και σε υπόστρωμα ITO, αντίστοιχα. Κάτω διαγράμματα: Φάσματα απόσβεσης για TM πολωμένο φως που προσπίπτει υπό γωνία $\theta = 45^\circ$ σε εξαγωνικά πλέγματα, πλεγματοτικής σταθεράς a_0 , νανοκυλίνδρων από άργυρο με διάμετρο $D = 20\text{nm}$ και ύψος $H = 50\text{nm}$ (αριστερό διάγραμμα), 100nm (μεσαίο διάγραμμα) και 150nm (δεξιό διάγραμμα).

Τα φάσματα απόσβεσης που μελετήσαμε μέχρι τώρα αντιστοιχούν σε εξαγωνικά επίπεδα νανοκυλίνδρων στον αέρα. Στην πράξη όμως πάντα υπάρχει ένα υπόστρωμα πάνω στο οποίο αναπτύσσονται οι περιοδικές δομές. Λαμβάνοντας υπόψη το υπόστρωμα, παρατηρούμε στο πάνω μέρος του Σχ. 5.2 ότι εμφανίζεται μια πρόσθετη κορυφή συντονισμού, η οποία εκδηλώνεται και για τις δύο πολώσεις και μετατοπίζεται προς χαμηλότερες συχνότητες καθώς αυξάνεται η διηλεκτρική συνάρτηση του υποστρώματος. Για ένα υπόστρωμα SiO_2 ($\epsilon_{\text{SiO}_2} = 2.13$), η κορυφή αυτή εμφανίζεται στα 3.07eV και ο διαμήκης διπολικός συντονισμός μετατοπίζεται ελαφρά προς χαμηλότερη συχνότητα, ενώ για ένα υπόστρωμα οξειδίου του ινδίου του κασσίτερου (ITO) ($\epsilon_{\text{ITO}} = 3.6$) η κορυφή αυτή κατεβαίνει στα 2.75eV και εκδηλώνεται ως ένας ώμος στην κύρια διαμήκη κορυφή συντονισμού. Συστηματικοί υπολογισμοί έδειξαν ότι η κορυφή αυτή μπορεί να αποδοθεί σε επιφανειακό συντονισμό, όπως θα συζητηθεί και στο επόμενο εδάφιο. Στη διεπιφάνεια μεταξύ ενός επιπέδου νανοκυλίνδρων και ενός διηλεκτρικού μέσου

μικρής διηλεκτρικής συνάρτησης όπως ο αέρας, αυτή η κατάσταση συντονισμού εμφανίζεται σε αρκετά υψηλές συχνότητες, έξω από την περιοχή που μελετάμε. Καθώς η διηλεκτρική συνάρτηση του υποστρώματος αυξάνεται, ο συντονισμός αυτός μετατοπίζεται προς χαμηλότερες συχνότητες και αλληλεπιδρά με τις υπόλοιπες καταστάσεις του συστήματος, όπως φαίνεται στο Σχ. 5.2.



Σχήμα 5.3: Φάσματα απόσβεσης για ένα εξαγωνικό πλέγμα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 70\text{nm}$, νανοκυλίνδρων από άργυρο με διάμετρο $D = 20\text{nm}$ και ύψος $H = 50\text{nm}$, χωρίς υπόστρωμα, στον αέρα, στην περιοχή της θεμελιώδους διαμήκους πλασμονικής κατάστασης, για φως προσπίπτον με κυματόνισμα $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$, όπου το k_x καλύπτει όλη τη διεύθυνση $\Gamma\bar{K}$ της EZB (Σχ. 2.6). Στη μαύρη περιοχή, έξω από τον κώνο φωτός, παρουσιάζουμε τη σχέση διασποράς των ιδιοκαταστάσεων του επιπέδου όπως υπολογίζονται από την Εξ. (2.67).

Στο Σχ. 5.3 παρουσιάζουμε φάσματα απόσβεσης για ένα επίπεδο νανοκυλίνδρων αργύρου ($a_0 = 70\text{nm}$, $D = 20\text{nm}$, $H = 50\text{nm}$) χωρίς υπόστρωμα, στον αέρα, γύρω από την ιδιοσυχνότητα της θεμελιώδους διαμήκους πλασμονικής κατάστασης, για φως που προσπίπτει με κυματόνισμα $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$, $0 \leq k_x \leq 4\pi/3a_0$, δηλαδή κατά μήκος της διεύθυνσης $\Gamma\bar{K}$ της EZB του Σχ. 2.6. Αυξάνοντας το k_x η παράλληλη στον άξονα των νανοκυλίνδρων συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου μεγαλώνει, και κατά συνέπεια οι διαμήκεις πλασμονικές καταστάσεις διεγείρονται ισχυρότερα, οδηγώντας σε ψηλότερες κορυφές συντονισμού στο φάσμα απόσβεσης. Στη μαύρη περιοχή του Σχ. 5.3, έξω από τον κώνο φωτός, η λευκή καμπύλη αντιπροσωπεύει τη σχέση διασποράς των συλλογικών ιδιοκαταστάσεων του επιπέδου, όπως υπολογίζονται από την Εξ. (2.67). Αυτές οι πλασμονικές καταστάσεις είναι εντοπισμένες στο επίπεδο των νανοκυλίνδρων και δεν διεγείρονται από ένα εξωτερικά προσπίπτον κύμα. Μακριά

από το επίπεδο έχουν τη μορφή φθίνοντος κύματος και δεν συζεύγγονται με μια διαδιδόμενη κατάσταση του ΗΜ πεδίου· η ορμή και η ενέργεια των φωτονίων δεν μπορούν να διατηρηθούν ταυτόχρονα. Οι συχνότητες αυτών των καταστάσεων μπορούν να ρυθμιστούν ώστε να καλύψουν όλο το ορατό και μέρος του υπερύθρου μεταβάλλοντας τις γεωμετρικές παραμέτρους της δομής, και ιδιαίτερα το ύψος των νανοκυλίνδρων. Είναι επίσης αξιοσημείωτη η εμφάνιση περιοχών επίπεδης σχέση διασποράς, στην περιοχή κυματάρθμων $0.22 < k_x a_0 / 2\pi < 0.26$, και στην περιοχή $0.45 < k_x a_0 / 2\pi < 0.666$. Τέτοιες καταστάσεις μηδενικής (και σχεδόν μηδενικής) ταχύτητας ομάδος μπορούν να φανούν σημαντικές σε εφαρμογές κυματοδηγησης και υπερφασκών [63, 65, 288, 289].

5.3 Ενίσχυση εκπομπής φθορισμού κοντά σε επίπεδο μεταλλικών νανοκυλίνδρων

Όπως συζητήσαμε στο Εδ. 4.2, η αυθόρμητη εκπομπή ενός διεγερμένου ενεργού κέντρου επηρεάζεται σημαντικά από το περιβάλλον του. Στο Εδ. 4.2 εξετάσαμε την αλληλεπίδραση ενός τέτοιου ενεργού κέντρου, το οποίο αντιμετωπίζεται κλασσικά ως ένα σημειακό δίπολο, με μεμονωμένο μεταλλικό σωματίδιο. Εξίσου σημαντική μπορεί να είναι και η αλληλεπίδραση ενός διπόλου με μια επιφάνεια, και ιδιαίτερα με ένα περιοδικά δομημένο πλακίδιο. Η εκπομπή ενός διπόλου κοντά σε μονοδιάστατες στρωματικές διηλεκτρικές δομές έχει περιγραφεί κλασσικά μέσω απλών υπολογισμών με βάση τον πίνακα μεταφοράς [290]. Πρόσφατα εξάλλου παρουσιάστηκε μια λεπτομερής περιγραφή της αυθόρμητης εκπομπής ενός διπόλου κοντά σε τέτοιες δομές, τόσο με κλασσική όσο και με κβαντομηχανική ανάλυση των φαινομένων [291], ενώ μια αντίστοιχη μελέτη για ένα δίπολο κοντά σε 2Δ και 3Δ κυματοδηγούς πυριτίου έδειξε ότι παρουσιάζεται σημαντική ενίσχυση της αυθόρμητης εκπομπής σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων [292]. Στο παρόν εδάφιο αναπτύσσουμε τον φορμαλισμό για τη μελέτη της αλληλεπίδρασης ενός διπόλου με 2Δ και 3Δ φωτονικές δομές, διηλεκτρικές ή μεταλλοδιηλεκτρικές, και δείχνουμε ένα παράδειγμα ενίσχυσης της αυθόρμητης εκπομπής για ένα δίπολο τοποθετημένο κοντά σε ένα επίπεδο μεταλλικών νανοκυλίνδρων.

Όπως και στην περίπτωση μεμονωμένων σωματιδίων, η αλληλεπίδραση ενός ενεργού κέντρου με μια περιοδική φωτονική δομή μπορεί να περιγραφεί με ικανοποιητική ακρίβεια κλασσικά. Το ΗΜ πεδίο ενός ταλαντούμενου διπόλου δίνεται, όπως είδαμε και στο Εδ. 4.2, από τη σχέση

$$\mathbf{E}_d(\mathbf{r}) = -\frac{\omega^2}{\epsilon\epsilon_0} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_d) \mathbf{p}, \quad (5.1)$$

όπου \mathbf{p} είναι η ηλεκτρική διπολική ροπή ενός διπόλου στη θέση \mathbf{r}_d , που ταλαντώνεται με κυκλική συχνότητα ω σε περιβάλλον διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ , και $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ ο ταυοστής Green. Στα πλαίσια της μεθόδου LMS είναι βολικό να θεωρήσουμε ότι το επίπεδο $x-y$ στο οποίο βρίσκεται το σημειακό δίπολο αποτελεί ένα από τα επίπεδα από τα οποία οικοδομείται μια στρωματική δομή (κατά τη διεύθυνση z), και κατά συνέπεια να χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση Green σε αναπαράσταση επίπεδων κυμάτων, Εξ. (5.31). Τότε το ηλεκτρικό πεδίο του διπόλου γράφεται

$$\mathbf{E}_d^\pm(\mathbf{r}) = \frac{iq^2 p}{2\epsilon_0 \epsilon} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i\mathbf{q}^\pm \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_d])}{q_z^\pm} [(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_1) \hat{\mathbf{e}}_1 + (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_2) \hat{\mathbf{e}}_2], \quad (5.2)$$

όπου $\mathbf{q}^\pm = \mathbf{q}_\parallel \pm \sqrt{q^2 - q_\parallel^2} \hat{\mathbf{z}}$ με $\mathbf{q}_\parallel = (q_x, q_y)$. Λαμβάνοντας υπόψη και τη 2Δ περιοδικότητα των επιπέδων που συνθέτουν τη φωτονική δομή, γράφουμε κατά τα γνωστά $\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}$ και μπορούμε να περιορίσουμε την ολοκλήρωση στην Εξ. (5.2) στην EZB. Τότε παίρνουμε

$$\mathbf{E}_d^\pm(\mathbf{r}) = \frac{iq^4 p_d}{2\epsilon_0 \epsilon} \int_{EZB} \frac{d^2 k_\parallel}{(2\pi q)^2} \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_d]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^\pm \exp(i\mathbf{K}_\mathbf{g}^\pm \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_d]) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_\mathbf{g}^\pm), \quad (5.3)$$

όπου

$$[E_d]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^\pm = \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_\mathbf{g}^\pm)}{K_{\mathbf{g}z}^+}, \quad (5.4)$$

και

$$\mathbf{K}_\mathbf{g}^\pm = \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g} \pm \sqrt{q^2 - |\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}|^2} \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.5)$$

Στο παράδειγμα που θα εξετάσουμε παρακάτω το δίπολο βρίσκεται στα αριστερά ενός σύνθετου πλακιδίου, σε θέση $\mathbf{r}_d = -\mathbf{d}_l$, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 5.4, ενώ θεωρούμε ότι το περιβάλλον μέσο στα αριστερά και τα δεξιά του πλακιδίου είναι το ίδιο. Τότε το πλάτος κάθε συνιστώσας επίπεδου κύματος που συνιστά το συνολικό διαδιδόμενο προς τα δεξιά του πλακιδίου κύμα δίνεται από τη σχέση

$$[E_{\text{tr}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+ = \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^I [E_d]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+, \quad (5.6)$$

ενώ το πλάτος κάθε συνιστώσας επίπεδου κύματος που συνιστά το συνολικό διαδιδόμενο προς τα αριστερά του πλακιδίου κύμα δίνεται από την

$$[E_{\text{tr}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^- = [E_d]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^- + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} [E_d]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+, \quad (5.7)$$

όπου \mathbf{Q}^I και \mathbf{Q}^{III} οι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης του πλακιδίου [Εξ. (2.110)], αντίστοιχα. Η συνολική ακτινοβολούμενη προς τα δεξιά και τα αριστερά ισχύς υπολογίζεται ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting σε ένα επίπεδο $x - y$ στα δεξιά του πλακιδίου και ένα επίπεδο $x - y$ στα αριστερά του διπόλου, αντίστοιχα (βλ. και Σχ. 5.4). Τότε παίρνουμε

$$P_{\text{tr}}^+ = \frac{3P_0}{8\pi q} \int_{EZB} d^2 k_\parallel \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} \left| \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^I \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+)}{K_{\mathbf{g}'z}^+} \right|^2 \text{Re} K_{\mathbf{g}z}^+ \quad (5.8)$$

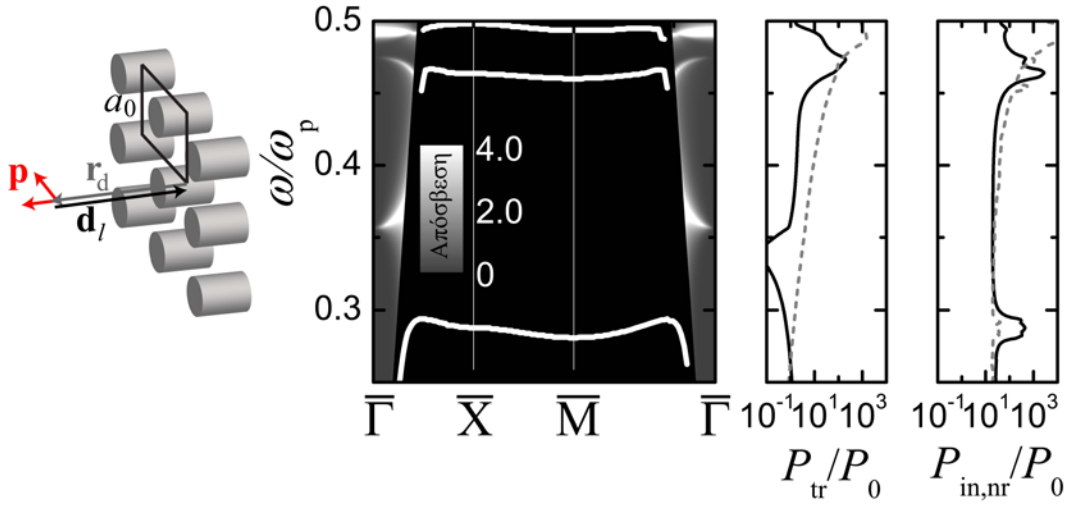
$$P_{\text{tr}}^- = \frac{3P_0}{8\pi q} \int_{EZB} d^2 k_\parallel \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} \left| \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_\mathbf{g}^-)}{K_{\mathbf{g}z}^+} + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+)}{K_{\mathbf{g}'z}^+} \right|^2 \text{Re} K_{\mathbf{g}z}^+, \quad (5.9)$$

όπου έχουμε κανονικοποιήσει με την ισχύ που εκπέμπει το δίπολο σε ομοιογενές περιβάλλον, Εξ. (4.10). Τότε η συνολική ακτινοβολούμενη ισχύς είναι $P_{\text{tr}} \equiv P_{\text{tr}}^+ + P_{\text{tr}}^-$. Όμοια, η αρχικά εκπεμπόμενη ισχύς από το δίπολο υπολογίζεται ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting σε ένα επίπεδο $x - y$ μεταξύ του διπόλου και του πλακιδίου, οπότε παίρνουμε

$$P_{\text{in}}^+ = \frac{3P_0}{8\pi q} \int_{EZB} d^2 k_\parallel \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} \left\{ \left| \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_\mathbf{g}^+)}{K_{\mathbf{g}z}^+} \right|^2 - \left| \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_\mathbf{g}^-)}{K_{\mathbf{g}z}^+} + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+)}{K_{\mathbf{g}'z}^+} \right|^2 \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \times \operatorname{Re} K_{\mathbf{g}z}^+ \\
& - \frac{3P_0}{4\pi q} \int_{\text{EZB}} d^2 k_{\parallel} \sum_{\mathbf{g}p} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+)}{K_{\mathbf{g}z}^+} \left[\sum_{\mathbf{g}'p'} Q_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}^{\text{III}} \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+)}{K_{\mathbf{g}'z}^+} \right]^* \right\} \operatorname{Im} K_{\mathbf{g}z}^+ \\
& \equiv P_{\text{in,r}} + P_{\text{in,nr}} .
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Στην παραπάνω σχέση ο πρώτος όρος περιέχει μόνο διαδιδόμενα κύματα και σχετίζεται με μεταφορά ενέργειας μέσω του μακρινού πεδίου, ενώ ο δεύτερος περιέχει μόνο φθίνοντα κύματα και σχετίζεται με μεταφορά ενέργειας μέσω του κοντινού πεδίου. Σε όλες τις ολοκληρώσεις χρειάζεται προσοχή για την αποφυγή πιθανών πόλων του $K_{\mathbf{g}z}^+$ για κάποια τιμή του k_{\parallel} .



Σχήμα 5.4: Σχηματική αναπαράσταση της αλληλεπίδρασης διπόλου με επίπεδο μεταλλικών νανοκυλίνδρων. Αριστερό διάγραμμα: Φάσματα απόσβεσης για ένα τετραγωνικό πλέγμα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 3c/\omega_p$, νανοκυλίνδρων διαμέτρου c/ω_p και ύψους $2.5c/\omega_p$, χωρίς υπόστρωμα, στον αέρα, για \mathbf{k}_{\parallel} κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας του Σχ. 2.6. Στη μαύρη περιοχή, έξω από τον κώνο φωτός, παρουσιάζονται οι σχέσεις διασποράς των ιδιοκαταστάσεων του επιπέδου. Μεσαίο διάγραμμα: Συνολική ακτινοβολούμενη ισχύς από το σύστημα δίπολο-επίπεδο νανοκυλίνδρων, για ένα δίπολο στα αριστερά του επιπέδου, σε απόσταση $0.05c/\omega_p$ από την επιφάνεια ενός νανοκυλίνδρου. Το δίπολο είναι πολωμένο κάθετα (μαύρη συνεχής γραμμή) ή παράλληλα (γκρι διακεκομμένη γραμμή) στο επίπεδο των νανοκυλίνδρων. Δεξιό διάγραμμα: Η συνολική ισχύς που σχετίζεται με το κοντινό πεδίο.

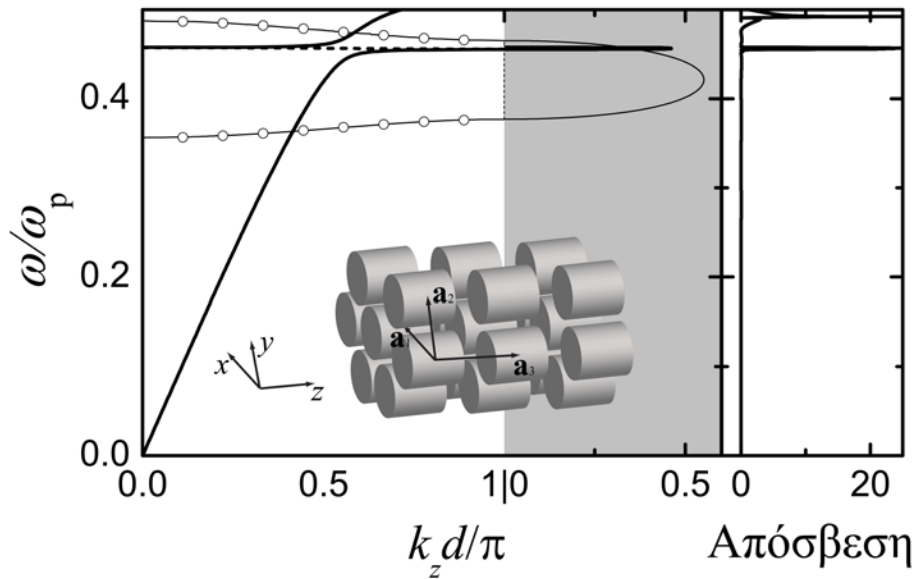
Ως παράδειγμα θεωρούμε ένα τετραγωνικό πλέγμα μεταλλικών νανοκυλίνδρων, η διηλεκτρική συνάρτηση των οποίων περιγράφεται από τη συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), με $\tau^{-1} = 0.002\omega_p$, τιμή κατάλληλη για τον άργυρο. Το φανταστικό μέρος της συνάρτησης Drude εξασφαλίζει την αποφυγή πόλων κατά τις ολοκληρώσεις στις Εξ. (5.8)-(5.10). Οι μεταλλικοί νανοκύλινδροι έχουν διάμετρο $D = c/\omega_p$ και ύψος $H = 2.5c/\omega_p$, ενώ η πλεγματική σταθερά είναι $a_0 = 3c/\omega_p$. Θεωρούμε ένα δίπολο στη θέση $\mathbf{r}_d = (0, 0, r_d)$ στα αριστερά του επιπέδου, με $r_d = 1.3c/\omega_p$, δηλαδή σε απόσταση $0.05c/\omega_p$ από την επιφάνεια ενός νανοκυλίν-

δρου, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 5.4. Το δίπολο μπορεί να ταλαντώνεται παράλληλα ή κάθετα στον άξονα των νανοκυλίνδρων. Στο Σχ. 5.4 παρατηρούμε μια σημαντική ενίσχυση τόσο της ισχύος που ακτινοβολείται από το σύστημα διπόλου-επιπέδου όσο και αυτής που παραμένει δεσμευμένη στο σύστημα, στην περιοχή συχνοτήτων της διπολικής πλασμαονικής κατάστασης που σχετίζεται με ταλαντώσεις ελεύθερων ηλεκτρονίων κάθετα στον άξονα των νανοκυλίνδρων ($0.44\omega_p - 0.50\omega_p$). Η ενίσχυση αυτή οφείλεται στη μεγάλη πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων, όπως φαίνεται από τις κορυφές στο φάσμα απόσβεσης και τις αντίστοιχες καμπύλες διασποράς έξω από τον κώνο φωτός. Η ενίσχυση αυτή παρατηρείται και για τους δύο προσανατολισμούς του διπόλου διότι το ηλεκτρικό πεδίο του διπόλου μπορεί να διεγείρει αυτές τις πλασμαονικές καταστάσεις και στις δύο περιπτώσεις, όπως φαίνεται από την Εξ. (5.2). Αντίθετα, έχει ενδιαφέρον ότι δεν παρατηρείται ενίσχυση της ακτινοβολούμενης ενέργειας στην περιοχή της θεμελιώδους διαμήκους διπολικής κατάστασης. Σε αυτή την περιοχή, η ενέργεια που εκπέμπεται από το δίπολο συζεύγνυται κυρίως μέσω του κοντινού πεδίου με τις ιδιοκαταστάσεις του επιπέδου, οι οποίες δεν είναι διαδιδόμενες στο περιβάλλον. Έτσι, παρατηρείται μεγάλη ενίσχυση της ενέργειας που σχετίζεται με το κοντινό πεδίο, η οποία όμως δεν ακτινοβολείται μακριά από το επίπεδο. Η ενίσχυση αυτή είναι μεγαλύτερη όταν το δίπολο είναι προσανατολισμένο παράλληλα στον άξονα των νανοκυλίνδρων, όπως αναμένεται από την Εξ. (5.2). Επιπλέον, παρατηρείται μια μικρού ύψους ευρεία κορυφή στην περιοχή του συντονισμού στο φάσμα απόσβεσης που σχετίζεται με τη θεμελιώδη διαμήκη πλασμαονική κατάσταση ($0.35\omega_p - 0.40\omega_p$). Στην περιοχή αυτή το μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας που εκπέμπεται από το δίπολο επίσης δεν ακτινοβολείται, αλλά απορροφάται.

5.4 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου

Ας θεωρήσουμε τώρα έναν άπειρο 3Δ κρύσταλλο που οικοδομείται ως επαλληλία διαδοχικών εξαγωνικών επιπέδων $x - y$ από νανοκυλίνδρους που περιγράφονται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), αγνοώντας τις απώλειες προς το παρόν θέτοντας $\tau^{-1} = 0$, με διάμετρο $D = c/\omega_p$ και ύψος $H = 2.5c/\omega_p$. Τα διαδοχικά επίπεδα διατάσσονται με τον άξονα των νανοκυλίνδρων κατά τη διεύθυνση z , όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ. 5.5, και ορίζονται από τα διανύσματα $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0, 0)$ και $\mathbf{a}_2 = a_0(1/2, \sqrt{3}/2, 0)$, ενώ η μετάβαση από το ένα επίπεδο στο άλλο γίνεται μέσω του διανύσματος $\mathbf{a}_3 = d(0, 0, 1)$. Παίρνουμε $a_0 = d = 3c/\omega_p$, τιμές που εξασφαλίζουν σχετικά ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ των νανοκυλίνδρων, ενώ οι διαμήκεις και εγκάρσιες πλασμαονικές καταστάσεις είναι αρκετά απομακρυσμένες.

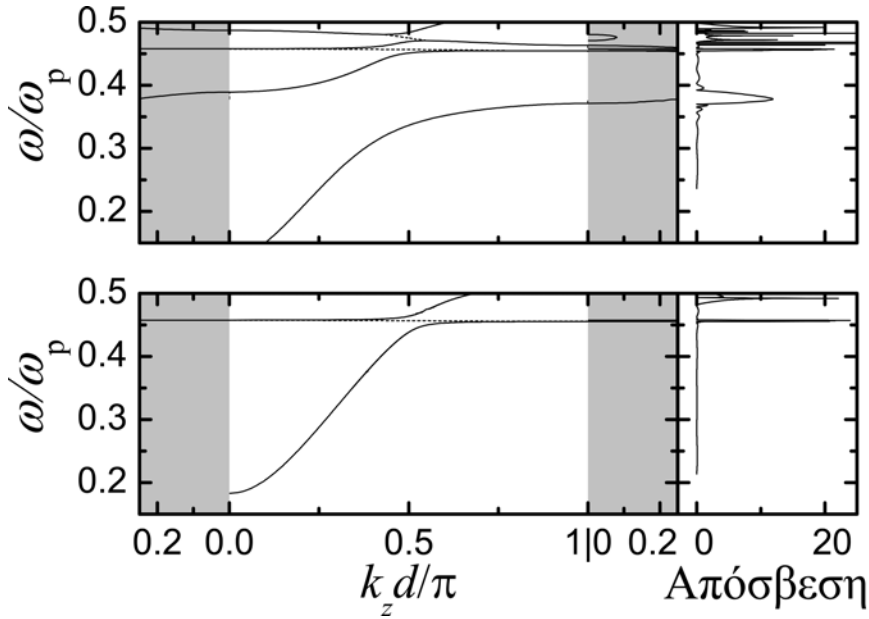
Στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 5.5 παρουσιάζουμε τη μιγαδική φωτονική δομή του κρυστάλλου κατά μήκος της διεύθυνσης $[001]$, δηλαδή για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$. Η συμμετρία των ζωνών κατά μήκος αυτής της διεύθυνσης είναι αυτή της ομάδας C_{6v} [114]. Σε χαμηλές συχνότητες παίρνουμε μια γραμμική σχέση διασποράς, συμμετρίας E_1 (διπλά εκφυλισμένη), όπως αναμένεται για διάδοση σε ένα ομοιογενές ενεργό μέσο που χαρακτηρίζεται από δείκτη διάθλασης ανεξάρτητο από τη συχνότητα. Ακόμη, εμφανίζονται επίπεδες ζώνες που προέρχονται από τις πλασμαονικές καταστάσεις των μεμονωμένων νανοκυλίνδρων που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Κατά μήκος της διεύθυνσης $[001]$, στην περιοχή συχνοτήτων που μας απασχολεί, υπάρχει μια διπλά εκφυλισμένη ζώνη συμμετρίας E_1 , που προέρχεται από τις πλασμαονικές καταστάσεις συμμετρίας E_{1g} των μεμονωμένων νανοκυλίνδρων (βλ. Εδ. 5.1). Η ζώνη αυτή αλληλεπιδρά με την εκτεταμένη ζώνη του ισοδύναμου μέσου οδηγώντας σε ένα στενό χάσμα



Σχήμα 5.5: Σχηματική αναπαράσταση του εξαγωγικού φωτονικού κρυστάλλου μεταλλικών νανοκυλίνδρων που εξετάζουμε. Οι κύλινδροι είναι διατεταγμένοι με τον άξονά τους κατά τη διεύθυνση z , και έχουν διάμετρο $D = c/\omega_p$ και ύψος $H = 2.5c/\omega_p$, ενώ οι πλεγματικές σταθερές είναι $a_0 = d = 3c/\omega_p$. Αριστερό διάγραμμα: Η μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κατά τη διεύθυνση $[001]$. Το πραγματικό μέρος των μιγαδικών ζωνών παρουσιάζεται με διακεκομμένες γραμμές, ενώ το φανταστικό τους μέρος σχεδιάζεται στη σκιασμένη περιοχή. Οι χοντρές και λεπτές γραμμές συμβολίζουν διπλά εκφυλισμένες και μη εκφυλισμένες ζώνες, αντίστοιχα. Δεξιό διάγραμμα: Συντελεστής απόσβεσης φωτός που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου.

υβριδισμού γύρω από τη συχνότητα $0.46\omega_p$. Επιπλέον, παρουσιάζονται δύο μη εκφυλισμένες επίπεδες ζώνες συμμετρίας A_1 , γύρω από τις συχνότητες $0.36\omega_p$ και $0.47\omega_p$, που προέρχονται από τις πλασμονικές καταστάσεις συμμετρίας A_{2u} και A_{1g} των μεμονωμένων νανοκυλίνδρων, αντίστοιχα. Αυτές οι μη εκφυλισμένες ζώνες δεν αλληλεπιδρούν με τη ζώνη του ενεργού μέσου και, επίσης, δεν διεγείρονται από ένα εξωτερικά προσπίπτον κύμα. Προέρχονται από ασθενή αλληλεπίδραση μεταξύ δέσμιων καταστάσεων του ΗΜ πεδίου εντοπισμένων γύρω από τα διαδοχικά επίπεδα (001) του κρυστάλλου. Πράγματι, οι ιδιοσυχνότητες ενός πλακιδίου από $N_L = 8$ τέτοια επίπεδα νανοκυλίνδρων, για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$, σχεδιασμένες σαν συναρτήσεις του ανηγμένου κυματάριθμου $k_z = \kappa\pi/(N_L + 1)c$, $\kappa = 1, 2, \dots, N_L$, ($N_L = 8$), αναπαράγουν τις αντίστοιχες καμπύλες διασποράς του άπειρου κρυστάλλου, όπως φαίνεται με ανοιχτούς κύκλους στο Σχ. 5.5.

Πέρα από τις συνηθισμένες ζώνες συχνοτήτων (πραγματικό k_z), στο Σχ. 5.5 παρουσιάζουμε και τις γραμμές πραγματικής συχνότητας για μιγαδικές ιδιοτιμές k_z , που όπως είπαμε αποτελούν την αναλυτική συνέχεια των συνηθισμένων ζωνών στο μιγαδικό επίπεδο k_z . Η γραμμή πραγματικής συχνότητας της κατάλληλης συμμετρίας (E_1 στη συγκεκριμένη περίπτωση) με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος του k_z σε μια περιοχή χάσματος συχνοτήτων



Σχήμα 5.6: Αριστερά διαγράμματα: Μιγαδική φωτονική δομή των ζωνών συμμετρίας Q_1 (πάνω) και Q_2 (κάτω) για τον κρύσταλλο του Σχ. 5.5 και $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.2, 0)$. Δεξιά διαγράμματα: Φάσματα απόσβεσης για TM (πάνω) και TE (κάτω) πολωμένο φως που προσπίπτει σε ένα πλακίδιο από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_{\parallel} = \pi/a_0(0.2, 0)$.

καθορίζει την εξασθένιση των κυμάτων σε αυτή την περιοχή. Η απόσβεση ενός πεπερασμένου πλακιδίου του κρυστάλλου, αποτελούμενου από N_L επίπεδα (001), είναι

$$-\ln \mathcal{T}(\omega) = 2dN_L |\text{Im}k_z(\omega)| + \text{σταθ.}, \quad (5.11)$$

για δεδομένη τιμή του \mathbf{k}_{\parallel} . Στο δεξιό διάγραμμα του Σχ. 5.5 παρουσιάζεται η απόσβεση ενός πλακιδίου του κρυστάλλου αποτελούμενου από $N_L = 8$ επίπεδα (001), σε κάθετη πρόσπτωση. Αξίζει να σημειωθεί ότι, πέρα από την ισχυρή απόσβεση στην περιοχή του χάσματος, γύρω από τη συχνότητα $0.46\omega_p$, παρατηρείται και μία δεύτερη κορυφή απόσβεσης, στη συχνότητα $0.49\omega_p$, δηλαδή σε περιοχή διαδιδόμενων καταστάσεων του άπειρου κρυστάλλου. Η κορυφή αυτή παραμένει πρακτικά αμετάβλητη μεταβάλλοντας το πάχος του πλακιδίου, σε αντίθεση με ό,τι αναμένεται από την Εξ. (5.11), που προβλέπει γραμμική αύξηση της απόσβεσης με το πάχος του πλακιδίου στο χάσμα. Είναι επίσης αξιοσημείωτο ότι στην πραγματικότητα η κορυφή αυτή είναι διπλή. Η κορυφή αυτή αποδίδεται σε επιφανειακό συντονισμό, όπως συζητήθηκε και στο Εδ. 5.2, και οι δύο κλάδοι της σχετίζονται με συντονισμούς στις δύο επιφάνειες του πλακιδίου, που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους.

Στα αριστερά διαγράμματα του Σχ. 5.6 παρουσιάζουμε τη μιγαδική δομή ζωνών του κρυστάλλου για $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi/a_0(0.2, 0)$. Για $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$, $0 < k_x < 4\pi/3a_0$, δηλαδή κατά μήκος της διεύθυνσης $\overline{\Gamma K}$ της EZB, η σημειακή ομάδα του κυματανύσματος είναι η C_{1h} και οι ιδιοκαταστάσεις του ηλεκτρικού πεδίου μπορούν να ταξινομηθούν ως άρτιες (Q_1) ή περιττές (Q_2) ως προς την ανάκλαση στο επίπεδο $x-z$. Σύμφωνα με τη θεωρία ομάδων, μια διπλά εκφυλισμένη

ζώνη συμμετρίας E_1 (για $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$) χωρίζεται για $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$ σε μία ζώνη συμμετρίας Q_1 και μία συμμετρίας Q_2 . Όμοια, μια ζώνη συμμετρίας A_1 δίνει μία ζώνη Q_1 , όπως φαίνεται στα αριστερά διαγράμματα του Σχ. 5.6. Ένα TM ή TE πολωμένο ΗΜ κύμα που προσπίπτει σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο διαδοχικών επιπέδων (001) του κρυστάλλου με $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$ διεγείρει ζώνες συμμετρίας Q_1 ή Q_2 , αντίστοιχα, και μέσω αυτών διαδίδεται στο άλλο άκρο του πλακιδίου. Στις περιοχές των χασμάτων, όπου δεν υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις Bloch, ο συντελεστής διέλευσης καθορίζεται από τη μιγαδική ζώνη κατάλληλης συμμετρίας με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος: το πλάτος του κύματος μειώνεται εκθετικά μέσα στο χάσμα με συντελεστή εξασθένισης ανάλογο του $|\text{Im}k_z(\omega)|$ αυτής της ζώνης, όπως δείχνουμε στο δεξιό μέρος του Σχ. 5.6.

5.5 Ομοιογενοποίηση άπειρου κρυστάλλου

Ο κρύσταλλος που εξετάσαμε στο προηγούμενο εδάφιο έχει μονοαξονική συμμετρία, και αναμένουμε ότι για αρκετά μεγάλα μήκη κύματος σε σύγκριση με την πλεγματική του σταθερά θα μπορεί να περιγραφεί με ταυστές ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης και ισοδύναμης μαγνητικής διαπερατότητας, Εξ. (4.19). Δεδομένου ότι ο κρύσταλλος δεν περιέχει κάποιο στοιχείο που θα μπορούσε να οδηγεί σε μαγνητικό συντονισμό, δικαιολογούμε να θεωρήσουμε ότι $\mu_{\text{eff}(\parallel)} = \mu_{\text{eff}(z)} = 1$, (η ακρίβεια της προσέγγισης θα σχολιασθεί παρακάτω). Συνεπώς, η διαδικασία ομοιογενοποίησης που περιγράψαμε στο Εδ. 3.4, ανάγεται στον υπολογισμό των συνιστωσών του ταυστή ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ και $\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, μόνο, και άρα μπορούμε να εφαρμόσουμε μια πιο απλοποιημένη εκδοχή της.

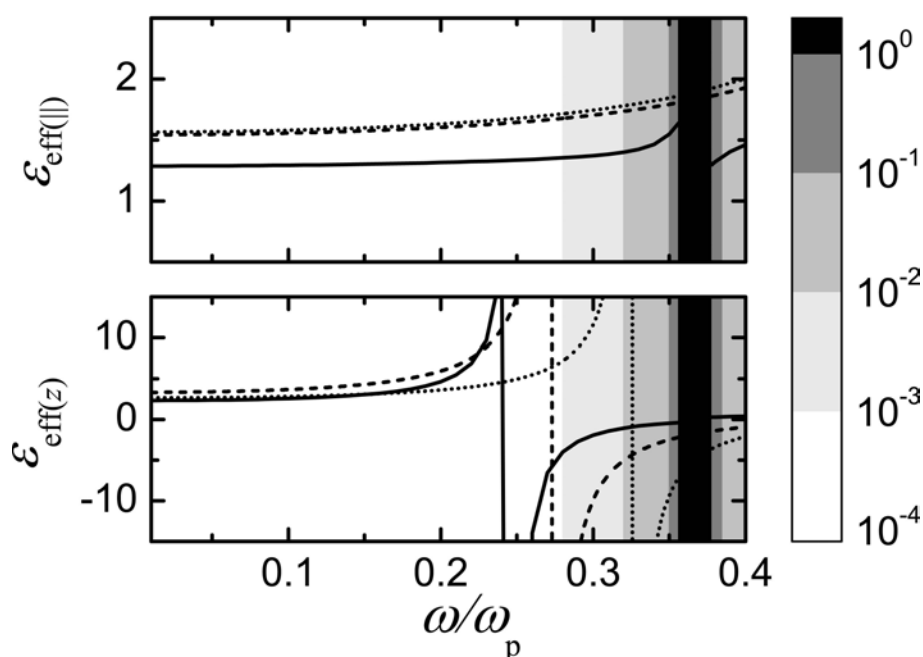
Οι σχέσεις διασποράς (4.20) και (4.21) για τη διάδοση ενός κύματος κυκλικής συχνότητας ω και κυματανύσματος \mathbf{q} σε ένα ισοδύναμο ομοιογενές μονοαξονικό μέσο, θεωρώντας ότι $\mu_{\text{eff}(\parallel)} = \mu_{\text{eff}(z)} = 1$, απλοποιούνται στις

$$q_{\parallel}^2 + q_{(\text{TE})z}^2 = \varepsilon_{\text{eff}(\parallel)} \frac{\omega^2}{c^2} \quad (5.12)$$

και

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}}{\varepsilon_{\text{eff}(z)}} q_{\parallel}^2 + q_{(\text{TM})z}^2 = \varepsilon_{\text{eff}(\parallel)} \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (5.13)$$

για τις πολώσεις TE και TM, αντίστοιχα, όπου $\mathbf{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$ κατά τα γνωστά. Πραγματοποιώντας προσαρμογές ελαχίστων τετραγώνων σε ζεύγη δεδομένων σχέσης διασποράς, (q_{\parallel}^2, q_z^2) , που υπολογίζουμε με τη μέθοδο LMS κατά μήκος πολλών διευθύνσεων διάδοσης και για τις δύο πολώσεις, στις Εξ. (5.12) και (5.13), τις οποίες ξαναγράφουμε σαν γραμμικές εξισώσεις του $q_{(\text{TE})z}^2$ ή $q_{(\text{TM})z}^2$ συναρτήσεως του q_{\parallel}^2 , παίρνουμε δύο τιμές για το $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ από τους σταθερούς όρους των εξισώσεων αυτών, καθώς και το πηλίκο $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(z)}$ από την προσαρμογή στην Εξ. (5.13). Παίρνοντας τον μέσο όρο των δύο τιμών για το $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ μπορούμε στη συνέχεια να υπολογίσουμε το $\varepsilon_{\text{eff}(z)}$ από το πηλίκο $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(z)}$. Η ποιότητα των καμπυλών προσαρμογής, που ποσοτικά περιγράφεται από την τυπική απόκλιση, καθώς και η συμφωνία μεταξύ των δύο τιμών για το $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ που υπολογίζονται ανεξάρτητα για τις δύο πολώσεις, παρέχουν αυστηρά κριτήρια για την ακρίβεια της υπόθεσης ενός ομοιογενούς μονοαξονικού μέσου που περιγράφεται από τις υπολογισμένες ισοδύναμες τοπικές ΗΜ παραμέτρους. Πρόσφατα



Σχήμα 5.7: Ισοδύναμες διηλεκτρικές συναρτήσεις $\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ και $\epsilon_{\text{eff}(z)}$ για τον κρύσταλλο μεταλλικών νανοκυλίνδρων του Σχ. 5.5, υπολογισμένες με προσαρμογές ελαχίστων τετραγώνων σε δεδομένα σχέσης διασποράς, για πολλές διευθύνσεις διάδοσης, στις εξισώσεις (4.20) και (4.21). Η τυπική απόκλιση των διαδικασιών προσαρμογής παρουσιάζεται με αποχρώσεις του γκρι σε λογαριθμική κλίμακα. Τα αποτελέσματα των θεωριών ισοδύναμου μέσου, Εξ. (3.12) και (3.13), παρουσιάζονται με διακεκομμένες και εστιγμένες γραμμές, αντίστοιχα.

εξάλλου προτάθηκε μια παρόμοια μέθοδος, κατά την οποία οι ισοδύναμες HM παράμετροι προκύπτουν από προσαρμογή πειραματικών δεδομένων για πολλές γωνίες πρόσπτωσης στις Εξ. (5.12) και (5.13) [160]. Η εξάρτηση των $\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ και $\epsilon_{\text{eff}(z)}$ από τη συχνότητα, όπως υπολογίστηκε με την παραπάνω διαδικασία, φαίνεται στο Σχ. 5.7, μαζί με την αντίστοιχη τυπική απόκλιση. Στην περιοχή του χάσματος οι διαδικασίες προσαρμογής αποτυγχάνουν τελείως στην περιοχή όπου η ζώνη με το μικρότερο φανταστικό μέρος έχει $\text{Re}k_z = 1$ (και άρα έχουμε μιγαδικούς συντελεστές στις εξισώσεις διασποράς), όπως εξάλλου αναμένεται μέσα στο χάσμα [138,293], και δεν παρουσιάζουμε τις υπολογισμένες παραμέτρους (μαύρη περιοχή). Όταν ωστόσο το πραγματικό μέρος της σχετικής ζώνης είναι $\text{Re}k_z = 0$, οι συντελεστές των σχέσεων διασποράς είναι πραγματικοί, η διαδικασία ομοιογενοποίησης δουλεύει αρκετά καλά και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Σχ. 5.7. Η τυπική απόκλιση των προσαρμογών είναι επίσης αρκετά μεγάλη και κοντά στα όρια της ΖΒ, που σημαίνει ότι μια περιγραφή του κρυστάλλου με όρους τοπικών ισοδύναμων παραμέτρων είναι αμφισβητήσιμη και σε αυτή την περιοχή, όπως θα περιμέναμε. Σημειώνουμε ότι, εφαρμόζοντας την πλήρη διαδικασία ομοιογενοποίησης που περιγράψαμε στο Εδ. 3.4 για ορισμένες χαρακτηριστικές συχνότητες, επιβεβαιώσαμε ότι η προσέγγιση $\mu_{\text{eff}(\parallel)} = \mu_{\text{eff}(z)} = 1$ ισχύει με μεγάλη ακρίβεια.

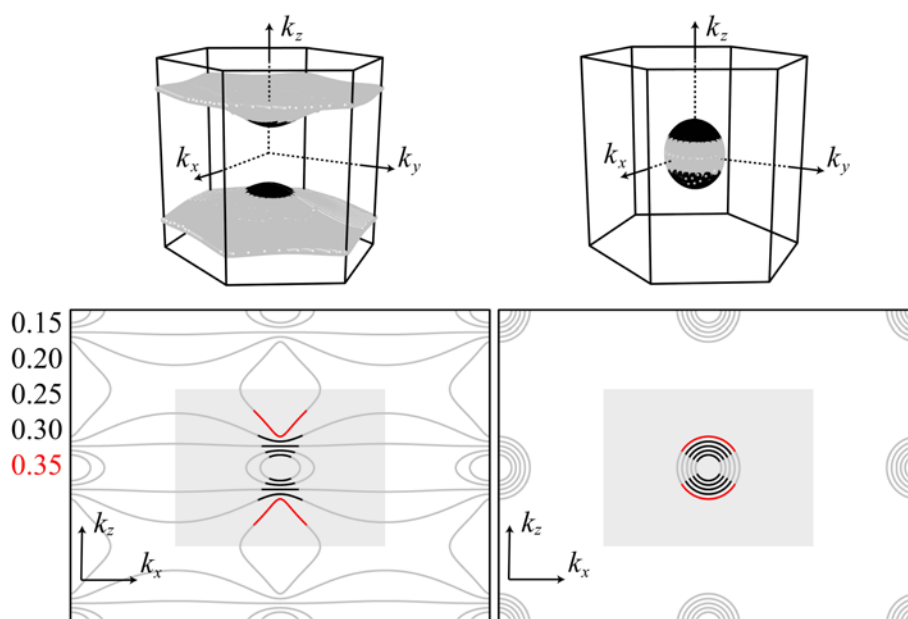
Στο Σχ. 5.7, εκτός από την ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση που υπολογίζεται από τη μέθοδο ομοιογενοποίησης άπειρου κρυστάλλου, δείχνουμε και τα αποτελέσματα της προσέγγισης Maxwell - Garnett, σύμφωνα με τις Εξ. (3.12) και (3.13), με παράγοντα αποπόλωσης $L_z = 0.14$, και $L_{\parallel} = 0.43$, όπως προκύπτει για τους συγκεκριμένους νανοκυλίνδρους από την Εξ. (3.14). Όπως φαίνεται στο σχήμα, η Εξ. (3.12) δίνει αποτελέσματα πλησιέστερα σε αυτά της μεθόδου ομοιογενοποίησης που περιγράψαμε από ό,τι η Εξ. (3.13). Ωστόσο, καμία από τις δύο θεωρίες δεν λαμβάνει υπόψη την ακριβή γεωμετρία του συστήματος, και πιο πολύπλοκα και ακριβή μοντέλα, όπως το μοντέλο αλληλεπιδρόντων διπόλων [294], αναμένεται να δίνουν καλύτερη σύμπτωση με τον ακριβή υπολογισμό.

5.6 Αρνητική διάθλαση και αυτοευθυγράμμιση

Το κυριότερο χαρακτηριστικό των ισοδύναμων διηλεκτρικών συναρτήσεων που υπολογίστηκαν στο προηγούμενο εδάφιο (βλ. Σχ. 5.7) είναι ο συντονισμός της $\epsilon_{\text{eff}(z)}$ στην περιοχή γύρω από τη συχνότητα $0.25\omega_p$. Στην περιοχή αυτή η $\epsilon_{\text{eff}(z)}$ αρχικά αυξάνεται ασυμπτωτικά και στη συνέχεια γίνεται αρνητική, μέχρι και το χάσμα, ενώ η $\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ παραμένει θετική και μεταβάλλεται αργά με τη συχνότητα. Όπως είδαμε στο Εδ. 1.2, τέτοια μέσα αποκαλούνται αόριστα και επιτρέπουν την εμφάνιση κυμάτων με αντίθετες ταχύτητες φάσης και ομάδος. Παρότι για $\omega \cong 0.3\omega_p$ το μήκος κύματος στο κενό είναι μόνο περίπου 7 φορές μεγαλύτερο από την πλεγματική σταθερά, η διαδικασία ομοιογενοποίησης που ακολουθήσαμε δίνει αξιόπιστες τοπικές ισοδύναμες παραμέτρους, με τυπική απόκλιση μικρότερη του 1%. Η ασυνήθιστη διαθλαστική συμπεριφορά για την οποία προδιαθέτει η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση επαληθεύεται από ακριβείς ηλεκτροδυναμικούς υπολογισμούς, όπως θα δούμε παρακάτω.

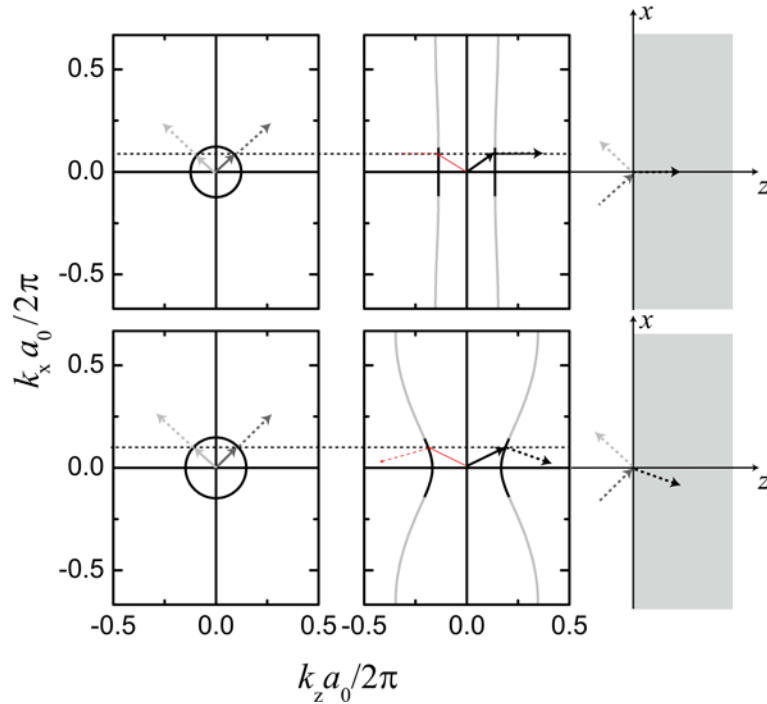
Εξαιτίας της μονοαξονικής συμμετρίας του κρυστάλλου που εξετάζουμε, μπορούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, να θέσουμε $k_y = 0$ και να εξετάσουμε τις πιο εύκολες στο χειρισμό καμπύλες σταθερής συχνότητας αντί για τις πλήρεις 3Δ επιφάνειες. Στο Σχ. 5.8 παρουσιάζουμε τέτοιες καμπύλες, $\omega(\mathbf{k}) = \text{σταθ.}$, στο επίπεδο $k_x - k_z$, για τις καταστάσεις συμμετρίας Q_1 και Q_2 , στην περιοχή συχνοτήτων μεταξύ $0.15\omega_p$ και $0.35\omega_p$. Είναι φανερό ότι καθώς η συχνότητα αυξάνεται και πλησιάζει στην περιοχή όπου η ομοιογενοποίηση δίνει αρνητική συνιστώσα $\epsilon_{\text{eff}(z)}$, οι καμπύλες σταθερής συχνότητας για τη συμμετρία Q_1 μεταβάλλονται σταδιακά από ελλείψεις σε ευθείες γραμμές και στη συνέχεια υπερβολές, ενώ για τη συμμετρία Q_2 παραμένουν σχεδόν σφαιρικές, όπως αναμένεται για ένα μέσο με θετική συνιστώσα $\epsilon_{\text{eff}(\parallel)}$. Στο Σχ. 5.8 παρουσιάζουμε για πληρότητα και τις αντίστοιχες 3Δ επιφάνειες σταθερής συχνότητας για $\omega = 0.30\omega_p$, μέσα στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} . Η επιφάνεια που αντιστοιχεί σε καταστάσεις τύπου TM είναι πράγματι υπερβολική, όπως αναμένεται. Κατά τα συνήθη, τα γκριζα τμήματα των επιφανειών και των καμπυλών συμβολίζουν περιοχές του \mathbf{k}_{\parallel} που αντιστοιχούν σε φθίνοντα κύματα στο περιβάλλον μέσο (αέρα).

Για να εξηγήσουμε τη φυσική σημασία των επιφανειών σταθερής συχνότητας που παρουσιάσαμε παραπάνω, ακολουθούμε τη διαδικασία ανάλυσης που παρουσιάσαμε στο Εδ. 2.8, για $k_y = 0$, σε δύο συχνότητες ιδιαίτερου ενδιαφέροντος: $\omega = 0.25\omega_p$ (πάνω διάγραμμα στο Σχ. 5.9) και $\omega = 0.30\omega_p$ (κάτω διάγραμμα στο Σχ. 5.9). Από τη στιγμή που οι καταστάσεις συμμετρίας Q_2 , που διεγείρονται από TE πολωμένο φως, δεν παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, περιορίζουμε την ανάλυσή μας στις καταστάσεις συμμετρίας Q_1 , οι οποίες διεγείρονται από TM πολωμένο φως. Στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 5.9 βλέπουμε ότι σε συχνότητα $0.25\omega_p$



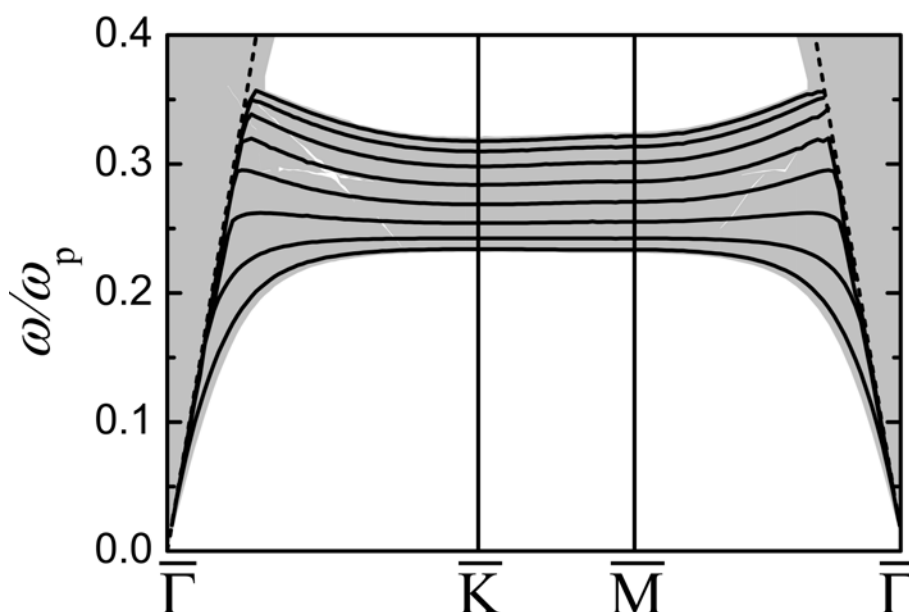
Σχήμα 5.8: Καμπύλες σταθερής συχνότητας στο επίπεδο k_x-k_z ($k_y = 0$), για τις καταστάσεις συμμετρίας Q_1 (αριστερά) και Q_2 (δεξιά), στις συχνότητες που φαίνονται στο περιθώριο (σε μονάδες ω_p), αυξανόμενες από το κέντρο προς τα έξω, για τον κρύσταλλο του Σχ. 5.5. Το σκιασμένο ορθογώνιο συμβολίζει την προβολή της ανηγμένης ζώνης \mathbf{k} σε αυτό το επίπεδο. Μόνο τα μαύρα τμήματα των καμπυλών αντιστοιχούν σε διαδιδόμενα κύματα στον αέρα. Για πληρότητα παρουσιάζουμε αντίστοιχες 3D επιφάνειες σταθερής συχνότητας σε συχνότητα $0.30\omega_p$, μέσα στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} .

η καμπύλη σταθερής συχνότητας είναι παράλληλη στον άξονα k_x για όλες τις τιμές του k_x που αντιστοιχούν σε εξωτερικά προσπίπτοντα κύματα, όπως αναμένεται και από τη μορφή της συνιστώσας της ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης $\epsilon_{\text{eff}}(z)$ (Σχ. 5.7), που αποκλίνει ασυμπτωτικά. Αυτό σημαίνει ότι, στην περίπτωση αυτή, για κάθε γωνία πρόσπτωσης, η ταχύτητα ομάδος, και κατά συνέπεια η ροή ενέργειας του διαθλώμενου κύματος θα δείχνει προς την ίδια κατεύθυνση, τη θετική διεύθυνση z . Αυτό το φαινόμενο αποκαλείται *αυτοευθυγράμμιση* [295] και είχε ήδη παρατηρηθεί για 2Δ και 3Δ διηλεκτρικούς φωτονικούς κρυστάλλους [296–298], αλλά όχι για μεταλλοδιηλεκτρικούς. Ως φαινόμενο μπορεί να αξιοποιηθεί στον σχεδιασμό ολοκληρωμένων οπτικών κυκλωμάτων και σε παρόμοιες εφαρμογές [299]. Από την άλλη, στην περιοχή συχνοτήτων από $0.30\omega_p$ μέχρι περίπου $0.35\omega_p$ που ανοίγει το χάσμα, η αρνητική κλίση των καμπυλών σταθερής συχνότητας οδηγεί σε αρνητική διάθλαση των TM προσπίπτοντων κυμάτων, όπως φαίνεται στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 5.9 για συχνότητα $0.30\omega_p$. Αξίζει επίσης να σημειωθεί ότι, λόγω της μορφής των καμπυλών σταθερής συχνότητας, στην περιοχή συχνοτήτων από $0.25\omega_p$ μέχρι περίπου $0.32\omega_p$, όπου υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις στον κρύσταλλο (πραγματικό, μη μηδενικό k_z) για κάθε k_x μέσα στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} (βλ. Σχ. 5.8), κύματα οποιουδήποτε k_x , είτε διαδιδόμενα είτε φθίνοντα στον αέρα, συζεύγγονται με μια ζώνη και γίνονται διαδιδόμενα κύματα στον κρύσταλλο.



Σχήμα 5.9: Διαγράμματα κυματανυσμάτων στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τις καταστάσεις συμμετρίας Q_1 σε συχνότητα $0.25\omega_p$ (πάνω) και $0.30\omega_p$ (κάτω), για τον κρύσταλλο του Σχ. 5.5. Στα αριστερά διαγράμματα παρουσιάζονται οι καμπύλες σταθερής συχνότητας στον αέρα και στα δεξιά οι αντίστοιχες καμπύλες στον κρύσταλλο. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή παρέχει τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Τα συνεχή βέλη παριστούν το προσπίπτον (σκούρο γκρι), ανακλώμενο (ανοιχτό γκρι), και διαθλώμενο (μαύρο) κυματάνυσμα στα διάφορα μέσα. Με διακεκομμένα βέλη κάθετα στις καμπύλες σταθερής συχνότητας δείχνουμε τις αντίστοιχες ταχύτητες ομάδας. Τα λεπτά κόκκινα βέλη αντιστοιχούν σε κυματάνυσμα και ταχύτητες ομάδας διαθλώμενων κυμάτων για τα οποία η k_x συνιστώσα διατηρείται αλλά παραβιάζεται η αιτιότητα.

Όπως έχουμε συζητήσει, προκειμένου ένα πλακίδιο φωτονικού κρυστάλλου να μπορεί να αξιοποιηθεί σε εφαρμογές υπερφακών θα πρέπει να μπορεί να μεταφέρει τα φθίνοντα κύματα χωρίς απόσβεση στην άλλη του πλευρά, στην περιοχή που εμφανίζει αρνητική διάθλαση. Αυτό γίνεται μέσω επίπεδων επιφανειακών καταστάσεων ή καταστάσεων πλακιδίου. Στο Σχ. 5.10 δείχνουμε την προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου στις διευθύνσεις συμμετρίας της EZB της επιφάνειας (001). Κατά τα γνωστά, οι σκιασμένες περιοχές αντιπροσωπεύουν διαδιδόμενες καταστάσεις και οι λευκές περιοχές χάσματα. Με συνεχείς μαύρες γραμμές δείχνουμε στο σχήμα τις ιδιοκαταστάσεις ενός πλακιδίου από οκτώ διαδοχικά επίπεδα (001) του κρυστάλλου, όπως υπολογίστηκαν από την Εξ. (2.117). Οι καταστάσεις αυτές συνοδεύονται από σημαντική ενίσχυση του σχετικού στοιχείου του πίνακα διέλευσης, t_{00} , και στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι παρούσες σε όλη την περιοχή συχνοτήτων όπου παρουσιάζεται αρνητική διάθλαση. Καθώς ο αριθμός των επιπέδων αυξάνεται, οι καμπύλες διασποράς αυτών



Σχήμα 5.10: Προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 5.5 στην EZB της επιφάνειας (001) κατά μήκος των διευθύνσεων συμμετρίας του Σχ. 2.6. Με μαύρες συνεχείς γραμμές παρουσιάζουμε τις σχέσεις διασποράς των ιδιοκαταστάσεων ενός πλακιδίου αποτελούμενου από οκτώ επίπεδα (001) του κρυστάλλου. Οι διακεκομμένες γραμμές παριστούν τον κώνο φωτός στον αέρα.

των καταστάσεων πλησιάζουν μεταξύ τους, μέχρι, για πλακίδια μεγάλου πάχους, να καλύψουν όλη τη σκιασμένη περιοχή του Σχ. 5.10. Προφανώς, μεταβάλλοντας κατάλληλα το πάχος του πλακιδίου, μπορεί κανείς να λάβει τέτοιες καταστάσεις σε όποια συχνότητα απαιτείται από τις εφαρμογές.

Προκειμένου να εξετάσουμε τον ρόλο των απωλειών λόγω απορρόφησης, τις οποίες μέχρι τώρα αγνοούσαμε, θέτουμε στην Εξ. (3.1) $\tau^{-1} \neq 0$, οπότε όλες οι ζώνες γίνονται μιγαδικές. Παίρνοντας $\tau^{-1} \cong 0.01\omega_p$ (χρυσός), το φανταστικό μέρος των ζωνών που μας απασχόλησαν γίνεται μικρότερο ή ίσο του 0.04, από όπου προκύπτει ένα μήκος διάδοσης περίπου 8 πλεγματικών σταθερών κατά τη διεύθυνση διάδοσης. Αντίστοιχα, παίρνοντας $\tau^{-1} \cong 0.002\omega_p$ (άργυρος), το μήκος διάδοσης γίνεται της τάξης των 30-40 πλεγματικών σταθερών, που σημαίνει ότι πεπερασμένα πλακίδια του κρυστάλλου μπορούν πράγματι να αξιοποιηθούν σε πρακτικές εφαρμογές.

5.7 Κυματοδηγοί γραμμικών αλυσίδων μεταλλικών νανοκυλίνδρων

Περιοδικές γραμμικές αλυσίδες μεταλλικών νανωσωματιδίων προσελκύουν διαρκώς αυξανόμενο ενδιαφέρον από τότε που οι Quinten *et al.* έδειξαν για πρώτη φορά ότι τέτοιες δομές μπορούν να λειτουργήσουν ως κυματοδηγοί με διακριτική ικανότητα μικρότερη του μήκους κύματος [300]. Η ΗΜ ενέργεια μεταφέρεται κατά μήκος τέτοιων αλυσίδων κάτω από το όριο

της περίθλασης, χάρη στη διέγερση συλλογικών πλασμονικών καταστάσεων που προέρχονται από τους πλασμονικούς συντονισμούς των μεμονωμένων νανοσωματιδίων, ενώ το ΗΜ πεδίο παραμένει εντοπισμένο στη διηλεκτρική περιοχή μεταξύ των σωματιδίων [301–303]. Επιπλέον, οι αλυσίδες μεταλλικών νανοσωματιδίων μπορούν να συζευχθούν με διπολικούς εκπομπούς και να δράσουν ως αποτελεσματικές πηγές φωτονίων [304], ενώ ο σχηματισμός καταστάσεων ταλαντωτή επιτρέπει την απεικόνιση με διακριτική ικανότητα μικρότερη του μήκους κύματος [289]. Εξάλλου, έχοντας ως αφετηρία τέτοιες ευθύγραμμες αλυσίδες, μπορεί κανείς να προχωρήσει στον σχεδιασμό και τη μελέτη συνθετότερων οπτικών στοιχείων, όπως γωνίες και διακόπτες [305], διπλές αλυσίδες [306–308], ή τμηματικά ευθύγραμμες αλυσίδες [309].

Διάφορες μέθοδοι έχουν χρησιμοποιηθεί για τη θεωρητική μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων τέτοιων αλυσίδων, όπως για παράδειγμα η θεωρία σκέδασης Mie [300,310], η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου [311], η δυναμική ανάλυση των ιδιοκαταστάσεων [312], η μέθοδος πολλαπλής σκέδασης [313], και η μέθοδος της συνάρτησης Green [314,315]. Η πιο δημοφιλής προσέγγιση ωστόσο βασίζεται στην υπόθεση ότι τα νανοσωματίδια μπορούν να εξομοιωθούν με σημειακά αλληλεπιδρόντα δίπολα. Αυτό το απλό μοντέλο συζευγμένων διπόλων υιοθετήθηκε για πρώτη φορά για τον υπολογισμό της σχέσης διασποράς μιας γραμμικής περιοδικής αλυσίδας μεταλλικών νανοσφαιρών στο ημιστατικό όριο [316], και αποκάλυψε την ύπαρξη δύο διαφορετικών καταστάσεων κυματοδηγού: μια διπλά εκφυλισμένη κατάσταση στην οποία οι διπολικές ροπές των σφαιρών ταλαντώνονται κάθετα στην αλυσίδα, και μια μη εκφυλισμένη, όπου οι διπολικές ροπές ταλαντώνονται κατά μήκος της αλυσίδας. Σύντομα παρουσιάστηκαν βελτιώσεις του μοντέλου, λαμβάνοντας για παράδειγμα υπόψη ανώτερης τάξης πολύπολα, παραμένοντας ωστόσο στην ημιστατική προσέγγιση [317]. Ο Citrin [318], και οι Weber και Ford [319], ήταν οι πρώτοι που έλαβαν υπόψη τα πλήρη χρονικά εξαρτώμενα πεδία των ταλαντούμενων διπόλων, για άπειρες και πεπερασμένες αλυσίδες, αντίστοιχα, και παρατήρησαν αλληλεπίδραση των καταστάσεων κυματοδηγού με τον κώνο φωτός. Με αυτό τον τρόπο υπολογίστηκαν διαγράμματα διασποράς μιγαδικής συχνότητας συναρτήσει πραγματικού κυματάριθμου για άπειρου μήκους αλυσίδες μεταλλικών νανοσφαιρών, λαμβάνοντας υπόψη τα φαινόμενα υστέρησης και την απόσβεση λόγω ακτινοβολίας [320,321], τα οποία συγκρίθηκαν με αντίστοιχες πειραματικά προσδιορισμένες σχέσεις διασποράς [322]. Ανάλογη μελέτη έχει παρουσιαστεί και για καταστάσεις κυματοδηγού που προέρχονται από τους τετραπολικούς πλασμονικούς συντονισμούς των σφαιρών [323].

Στην πραγματικότητα, ο υπολογισμός σχέσεων μιγαδικής συχνότητας συναρτήσει πραγματικού κυματάριθμου είναι πιο κατάλληλος για αλυσίδες πεπερασμένου μήκους, όπου κανείς διεγείρει μια συγκεκριμένη ταλαντούμενη κατάσταση, που χαρακτηρίζεται από πραγματική σταθερά διάδοσης, και παρακολουθεί την εξασθένισή της με τον χρόνο, την οποία περιγράφει το φανταστικό μέρος της αντίστοιχης μιγαδικής ιδιοσυχνότητας. Στην περίπτωση των κυματοδηγών από την άλλη, ένα ΗΜ κύμα δεδομένης πραγματικής συχνότητας διεγείρει καταστάσεις κυματοδηγού που διαδίδονται με μιγαδική σταθερά διάδοσης [310]. Ωστόσο, πρόσφατα δείχτηκε ότι οι δύο αυτές προσεγγίσεις οδηγούν σε ίδια αποτελέσματα αν συμπεριληφθούν πηγές ενίσχυσης [324], οι οποίες συχνά συμπεριλαμβάνονται σε μεταλλοδιηλεκτρικά συστήματα για να εξισορροπήσουν τις απώλειες [325].

Ενώ οι γραμμικές περιοδικές αλυσίδες μεταλλικών νανοσφαιρών [300,316,320], νανοφλοιών [178], ή νανοκυλίνδρων με τον άξονά τους παράλληλο στο υπόστρωμα [303,306] έχουν μελετηθεί διεξοδικά, αντίστοιχες δομές μεταλλικών νανοκυλίνδρων με τον άξονά τους κάθε-

το στον υπόστρωμα δεν έχουν μελετηθεί, παρά το μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον που έχουν προσελκύσει, και παρότι το μοντέλο συζευγμένων διπόλων χρησιμοποιήθηκε πρόσφατα για τη μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων 2Δ πλεγμάτων τέτοιων σωματιδίων [294]. Στο εδάφιο αυτό θα μελετήσουμε τέτοιες αλυσίδες χρησιμοποιώντας τόσο τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης όσο και το μοντέλο συζευγμένων διπόλων, παρουσία και απουσία υποστρώματος, και θα σχολιάσουμε τις αδυναμίες του μοντέλου.

Το ηλεκτρικό πεδίο σε θέση $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ από ένα σημειακό δίπολο, με διπολική ροπή \mathbf{p} , που ταλαντώνεται με κυκλική συχνότητα ω σε ένα διηλεκτρικό περιβάλλον σχετικής διηλεκτρικής συνάρτησης ε (και μαγνητικής διαπερατότητας $\mu = 1$), υποθέτοντας χρονική εξάρτηση της μορφής $\exp(-i\omega t)$ είναι [83]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left[(1 - iqr) \frac{3(\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{p}}{r^3} + q^2 \frac{\mathbf{p} - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p})\hat{\mathbf{r}}}{r} \right] \exp(iqr), \quad (5.14)$$

όπου $q = \omega\sqrt{\varepsilon}/c$. Αυτή η μορφή του ηλεκτρικού πεδίου λαμβάνει πλήρως υπόψη τα φαινόμενα υστέρησης.

Ας θεωρήσουμε μια άπειρη ευθύγραμμη αλυσίδα, έστω κατά τον άξονα x , από ισαπέχοντες μεταλλικούς νανοκυλίνδρους, με απόσταση a_x μεταξύ τους, προσανατολισμένους κάθετα στην αλυσίδα. Στην περιοχή συχνοτήτων κοντά στη θεμελιώδη διαμήκη διπολική πλασματική κατάσταση τους, οι νανοκύλινδροι μπορούν να εξομοιωθούν με σημειακά δίπολα που ταλαντώνονται κατά μήκος του άξονα των νανοκυλίνδρων. Ο συντονισμός των νανοκυλίνδρων περιγράφεται ικανοποιητικά από την εξάρτηση του διαμήκους στοιχείου του τανυστή πολωσιμότητάς τους, $\alpha_z(\omega)$, από τη συχνότητα. Όπως αναφέραμε στο Εδ. 3.2, οι νανοκύλινδροι μπορούν να περιγραφούν σε καλή προσέγγιση ως ελλειψοειδή, οπότε η σχετική πολωσιμότητα γράφεται

$$\alpha_z(\omega) = \frac{V}{4\pi\varepsilon + L_z[\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon]} \varepsilon_1(\omega) - \varepsilon, \quad (5.15)$$

όπου V είναι ο όγκος του νανοκυλίνδρου, ε_1 η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου, και $0 < L_z < 1$ ο διαμήκης παράγοντας αποπόλωσης. Αν και υπάρχουν αναλυτικές εκφράσεις για την αποπόλωση ενός ελλειψοειδούς [Εξ. (3.14)], για λόγους σύγκρισης με τα αποτελέσματα υπολογισμών με βάση την πειραματική διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου είναι προτιμότερο να τον υπολογίσουμε από την απαίτηση ο πόλος της $\alpha_z(\omega)$ να βρίσκεται στην ίδια συχνότητα με την ιδιοσυχνότητα της διαμήκους διπολικής πλασματικής κατάστασης του νανοκυλίνδρου.

Η επαγόμενη διπολική ροπή σε έναν νανοκύλινδρο της άπειρης αλυσίδας ισούται με την ηλεκτρική πολωσιμότητά του επί το τοπικό ηλεκτρικό πεδίο, το οποίο, απουσία εξωτερικού πεδίου, αποτελείται από τα πεδία που δημιουργούν όλοι οι υπόλοιποι νανοκύλινδροι. Στην περίπτωση μας, που οι νανοκύλινδροι είναι διατεταγμένοι κάθετα στην αλυσίδα και το $\hat{\mathbf{r}}$ δείχνει κατά μήκος της αλυσίδας, $\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} = 0$. Επομένως, για τον n -οστό νανοκύλινδρο η επαγόμενη διπολική ροπή είναι

$$\mathbf{p}_n = \alpha_z(\omega) \sum_{m \neq n} \left[-(1 - iq|n - m|a_x) \frac{\mathbf{p}_m}{|n - m|^3 a_x^3} + q^2 \frac{\mathbf{p}_m}{|n - m|a_x} \right] e^{iq|n - m|a_x}. \quad (5.16)$$

Υποθέτοντας μια μορφή Bloch για τις διπολικές ροπές, $\mathbf{p}_m = \mathbf{p}_n \exp(ik_x[m - n]a_x)$, όπου k_x είναι η συνιστώσα του κυματανύσματος κατά μήκος της αλυσίδας, η Εξ. (5.16) οδηγεί στη

σχέση διασποράς

$$1 + 2 \frac{\alpha_z(\omega)}{a_x^3} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{m^3} - iqa_x \frac{1}{m^2} - q^2 a_x^2 \frac{1}{m} \right) \cos(k_x m a_x) e^{iqm a_x} = 0. \quad (5.17)$$

Τα άπειρα αθροίσματα στην Εξ. (5.17) μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει των πολυλογάρυθμων, $\text{Li}_N(z) = \sum_{m=1}^{\infty} z^m/m^N$ [326], και η Εξ. (5.17) να γραφεί στη μορφή

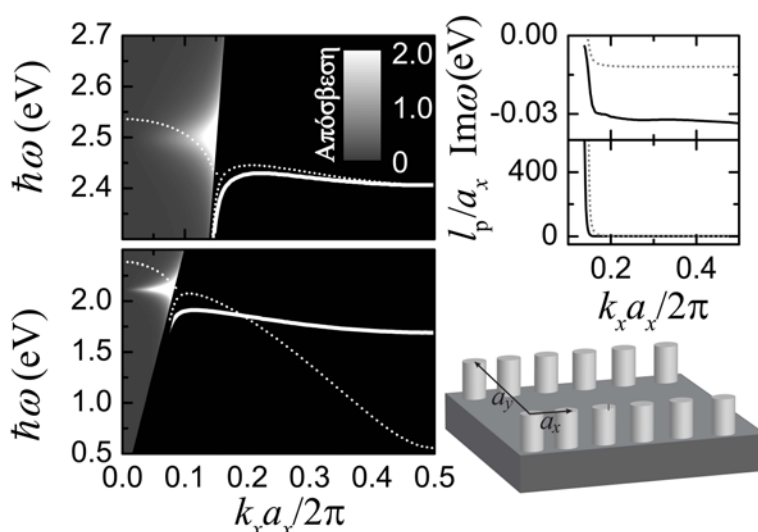
$$1 + \frac{\alpha_z(\omega)}{a_x^3} \Sigma(\omega, k_x) = 0, \quad (5.18)$$

με

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega, k_x) &= \left[\text{Li}_3(e^{i(q-k_x)a_x}) + \text{Li}_3(e^{i(q+k_x)a_x}) \right] - \\ &- iqa_x \left[\text{Li}_2(e^{i(q-k_x)a_x}) + \text{Li}_2(e^{i(q+k_x)a_x}) \right] - \\ &- (qa_x)^2 \left[\text{Li}_1(e^{i(q-k_x)a_x}) + \text{Li}_1(e^{i(q+k_x)a_x}) \right]. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Η Εξ. (5.18) επιλύεται αριθμητικά και υπολογίζει μιγαδικές ιδιοσυχνότητες για δεδομένες τιμές του k_x . Αξίζει να αναφερθεί ότι η διαδικασία επίλυσης είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη στις αρχικές συνθήκες. Συνήθως χρησιμοποιούνται ως αρχικές συνθήκες προσεγγιστικές αναλυτικές λύσεις στο ηλεκτροστατικό όριο ($q \rightarrow 0$) [324]. Εμείς ωστόσο θα χρησιμοποιούμε ως αρχικές συνθήκες τις ακριβείς λύσεις που προκύπτουν από τη μέθοδο LMS, οι οποίες αποτελούν εξαιρετικές αρχικές συνθήκες για τις λύσεις της Εξ. (5.18).

Σε ό,τι ακολουθεί θα θεωρούμε γραμμικές περιοδικές αλυσίδες άπειρου μήκους από νανοκυλίνδρους αργύρου, προσανατολισμένους με τον άξονά τους κάθετο στην αλυσίδα, είτε ελεύθερους στον αέρα είτε πάνω σε κάποιο υπόστρωμα. Τέτοιες αλυσίδες μπορούν να παρασκευαστούν με αφετηρία τη διαδικασία πλήρωσης των πόρων του Al_2O_3 με μέταλλο που ακολουθείται συχνά για την παρασκευή 2Δ πλεγμάτων, είτε χρησιμοποιώντας κατάλληλες μάσκες κατά την παρασκευή, είτε αφαιρώντας μηχανικά όσες σειρές νανοκυλίνδρων απαιτείται από το 2Δ πλέγμα [275]. Όπως περιγράψαμε στο Κεφ. 2, η μέθοδος LMS περιγράφει με ακρίβεια 2Δ ή 3Δ περιοδικές δομές. Για να περιγράψουμε μονοδιάστατα συστήματα, όπως οι γραμμικές αλυσίδες που μας απασχολούν εδώ, είναι αναγκαίο να καταφύγουμε σε μια ευρέως χρησιμοποιούμενη στα πλαίσια άλλων υπολογιστικών μεθόδων - προσέγγιση υπερπλέγματος, θεωρώντας ορθογώνια 2Δ πλέγματα με τη μία τους πλεγματική σταθερά, έστω a_y , πολύ μεγαλύτερη από την άλλη, a_x . Εξάλλου αυτή η προσέγγιση ανταποκρίνεται καλύτερα στις πειραματικά πραγματοποιήσιμες δομές [302, 303]. Σύμφωνα με την αναφορά [313], στην προσέγγιση υπερπλέγματος οι οπτικές ιδιότητες μιας μεμονωμένης γραμμικής αλυσίδας προκύπτουν ήδη όταν η απόσταση μεταξύ διαδοχικών αλυσίδων είναι περίπου δύο φορές μεγαλύτερη από την απόσταση των σωματιδίων μέσα στην αλυσίδα. Οι υπολογισμοί μας έδειξαν ότι για πλεγματική σταθερά a_y περίπου πέντε φορές μεγαλύτερη της a_x η οπτική απόκριση των πλεγμάτων παραμένει πρακτικά αμετάβλητη. Στο Σχ. 5.11 παρουσιάζουμε μια σχηματική περιγραφή των δομών που θα εξετάσουμε. Σε ό,τι ακολουθεί, θα θεωρούμε ότι το περιβάλλον μέσο είναι ο αέρας, και θα χρησιμοποιούμε για τη διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου τις πειραματικές τιμές των Johnson και Christy [199].

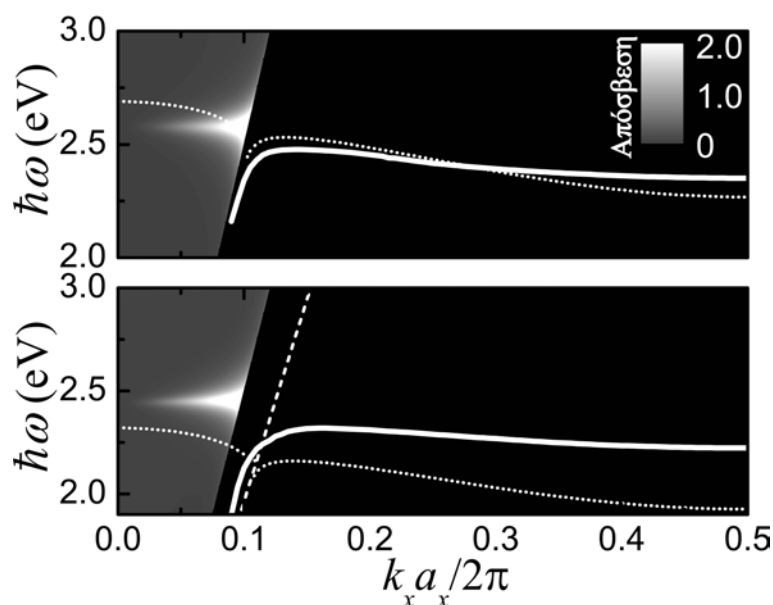


Σχήμα 5.11: Σχηματική αναπαράσταση των δομών γραμμικών περιοδικών αλυσίδων μεταλλικών νανοκυλίνδρων που εξετάζουμε. Πάνω αριστερά: Σχέση διασποράς της θεμελιώδους πλασμονικής κατάστασης κυματοδηγού για μια γραμμική αλυσίδα, με πλεγματική σταθερά $a_x = 75\text{nm}$, νανοκυλίνδρων αργύρου ($D = 20\text{nm}$, $H = 50\text{nm}$) προσανατολισμένων με τον άξονά τους κάθετο στην αλυσίδα, στον αέρα. Μέσα στον κώνο φωτός (έξω από τη μαύρη περιοχή) παρουσιάζουμε αντίστοιχα φάσματα απόσβεσης. Πάνω δεξιά: Εξάρτηση του φανταστικού μέρους των ιδιοσυχνοτήτων των καταστάσεων κυματοδηγού του αριστερού σχήματος (πάνω) και το αντίστοιχο μήκος διάδοσης (κάτω). Κάτω αριστερά: Η αντίστοιχη σχέση διασποράς για νανοκυλίνδρους με $D = 20\text{nm}$ και $H = 100\text{nm}$, σε απόσταση $a_x = 75\text{nm}$. Σε όλα τα διαγράμματα, οι συνεχείς και εστιγμένες γραμμές αντιστοιχούν σε υπολογισμούς με τη μέθοδο LMS και το μοντέλο συζευγμένων διπόλων, αντίστοιχα.

Στη μαύρη περιοχή του πάνω αριστερού διαγράμματος του Σχ. 5.11, έξω από τον κώνο φωτός, παρουσιάζουμε τη σχέση διασποράς για μια γραμμική περιοδική αλυσίδα νανοκυλίνδρων αργύρου με διάμετρο $D = 20\text{nm}$ και ύψος $H = 50\text{nm}$, με απόσταση $a_x = 75\text{nm}$ μεταξύ τους, όπως υπολογίστηκε από την Εξ. (2.68). Μέσα στον κώνο φωτός παρουσιάζουμε τα σχετικά φάσματα απόσβεσης. Η εστιγμένη γραμμή παριστά την αντίστοιχη σχέση διασποράς υπολογισμένη με το μοντέλο συζευγμένων διπόλων, σύμφωνα με την Εξ. (5.18). Είναι φανερό ότι οι δύο καμπύλες συμφωνούν πολύ καλά στην περιοχή έξω από τον κώνο φωτός, κάτι αναμενόμενο, αφού το βασικό κριτήριο ισχύος του μοντέλου, ο λόγος της ακτίνας των σωματιδίων προς τη μεταξύ τους απόσταση να είναι μικρότερος του $1/3$ [319], ικανοποιείται, αν και για μη σφαιρικά σωματίδια η ακτίνα δεν είναι σαφώς ορισμένη. Μέσα στον κώνο φωτός ωστόσο τα αποτελέσματα δεν συμφωνούν ικανοποιητικά. Σε αυτή την περίπτωση οι καταστάσεις δεν είναι εντοπισμένες αλλά ακτινοβολούν στο περιβάλλον, και η ιδιοσυχνότητά τους δεν συμφωνεί απόλυτα με την κορυφή του συντονισμού στο φάσμα απόσβεσης. Όπως και να 'χει, η εξάρτηση των συντονισμών απόσβεσης από τον κυματάρημο στο Σχ. 5.11 έχει την ίδια

μορφή με σχετικές πειραματικές καμπύλες για παρόμοιες δομές [327].

Στο πάνω δεξιό διάγραμμα του Σχ. 5.11 συγκρίνουμε τα φανταστικά μέρη των ιδιοσυχνοτήτων, τα οποία παρέχουν τον αντίστροφο χρόνο ζωής των καταστάσεων, υπολογισμένα με τις δύο μεθόδους. Είναι σαφές ότι, παρότι τα φανταστικά μέρη των ιδιοσυχνοτήτων συμφωνούν με πολύ καλή ακρίβεια, το μοντέλο συζευγμένων διπόλων υποεκτιμά τα φανταστικά μέρη, παρέχοντας κατά συνέπεια και πολύ μεγαλύτερα μήκη διάδοσης, l_p , όπως αυτά προκύπτουν από το γινόμενο της ταχύτητας ομάδος, $v_g = d\omega/dk_x$, επί τον αντίστροφο χρόνο ζωής (κάτω δεξιό διάγραμμα στο Σχ. 5.11). Αυτή η υποεκτίμηση των απωλειών είναι συστηματική, όπως επιβεβαιώσαμε μέσω υπολογισμών για διάφορους συνδυασμούς των σχετικών γεωμετρικών παραμέτρων, και αποκαλύπτει την αδυναμία του μοντέλου συζευγμένων διπόλων να περιγράψει με ακρίβεια την πραγματική κατανομή του πεδίου και την απόκριση των νανοκυλίνδρων. Συνεπώς, σε γραμμικές αλυσίδες μεταλλικών νανοκυλίνδρων οι απώλειες μπορεί να είναι σημαντικές και χρειάζεται να αντιμετωπίζονται ιδιαίτερα προσεκτικά [328]. Αξίζει ακόμα να σημειωθεί ότι, όπως φαίνεται στο Σχ. 5.11, ενώ κοντά στα όρια του κώνου φωτός το μήκος διάδοσης είναι της τάξης πολλών πλεγματοειδών σταθερών, μακριά από αυτά γίνεται πρακτικά αμελητέο, όπως αναμένεται για καταστάσεις επίπεδης σχέσης διασποράς.



Σχήμα 5.12: Πάνω διάγραμμα: Σχέση διασποράς της θεμελιώδους πλασμονικής κατάστασης κυματοδηγού για μια γραμμική περιοδική αλυσίδα, με πλεγματοειδή σταθερά $a_x = 50\text{nm}$, νανοκυλίνδρων αργύρου ($D = 20\text{nm}$, $H = 50\text{nm}$) προσανατολισμένων με τον άξονά τους κάθετο στην αλυσίδα, χωρίς υπόστρωμα. Μέσα στον κώνο φωτός (έξω από τη μαύρη περιοχή) παρουσιάζουμε αντίστοιχα φάσματα απόσβεσης. Κάτω διάγραμμα: Η αντίστοιχη σχέση διασποράς λαμβάνοντας υπόψη ένα υπόστρωμα SiO_2 . Η εστιγμένη γραμμή δείχνει τη σχέση διασποράς που υπολογίζεται από το μοντέλο συζευγμένων διπόλων θεωρώντας ένα περιβάλλον μέσο διηλεκτρικής συνάρτησης $\bar{\epsilon} = 1.56$ και η διακεκομμένη γραμμή τον κώνο φωτός σε αυτό το μέσο.

Τα αποτελέσματα του πάνω τμήματος του Σχ. 5.11 δείχνουν ότι το απλό μοντέλο συζευγμένων διπόλων περιγράφει ικανοποιητικά κοντούς νανοκυλίνδρους σε σχετικά μεγάλες αποστάσεις μεταξύ τους. Αυτό σαφώς δεν ισχύει για νανοκυλίνδρους μεγαλύτερου ύψους σε πιο μικρές αποστάσεις, που είναι και ευκολότερο να παρασκευαστούν. Συστηματικοί υπολογισμοί με σταθερή τη διάμετρο των νανοκυλίνδρων, $D = 20\text{nm}$, και τη μεταξύ τους απόσταση, $a_x = 50\text{nm}$, και μεταβλητό το ύψος τους, από 25 μέχρι 100nm, έδειξαν ότι οι σχέσεις διασποράς που υπολογίζονται με το μοντέλο συζευγμένων διπόλων αρχίζουν να αποκλίνουν σημαντικά από τις ακριβείς όταν το ύψος των νανοκυλίνδρων γίνεται μεγαλύτερο των $\sim 30\text{nm}$. Αυτή η παρατήρηση ξεκαθαρίζει ότι στην περίπτωση μη σφαιρικών σωματιδίων όλες οι διαστάσεις τους, και όχι μόνο το μέγεθός τους κατά τη διεύθυνση της αλυσίδας, πρέπει να είναι μικρότερες από την πλεγματική σταθερά προκειμένου το μοντέλο συζευγμένων διπόλων να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα. Στο κάτω μέρος του Σχ. 5.11 δείχνουμε τα σχετικά αποτελέσματα για νανοκυλίνδρους ύψους $H = 100\text{nm}$. Στην περίπτωση αυτή η απόκλιση είναι εντυπωσιακή, με την καμπύλη διασποράς που υπολογίζεται με το μοντέλο να καλύπτει μια ευρεία περιοχή στο ορατό και το υπέρυθρο, ενώ ο ακριβής υπολογισμός δίνει μια στενή ζώνη στο ορατό.

Τέλος, έχει ενδιαφέρον να μελετήσουμε την επίδραση του υποστρώματος, το οποίο υπάρχει πάντα στις ρεαλιστικές περιπτώσεις, στις καταστάσεις κυματοδηγού των αλυσίδων που εξετάσαμε. Τέτοιου είδους δομές, πάνω σε διηλεκτρικά ή μεταλλικά υποστρώματα, έχουν μελετηθεί στο παρελθόν [327, 329], και έχειδειχθεί ότι η παρουσία του υποστρώματος τροποποιεί σημαντικά τις οπτικές ιδιότητες της δομής. Ένας βασικός περιορισμός του μοντέλου συζευγμένων διπόλων είναι ότι δεν μπορεί να περιγράψει το υπόστρωμα. Μια πρόταση είναι να θεωρεί κανείς ένα διαφορετικό περιβάλλον μέσο για τα νανοςωματίδια, με διηλεκτρική συνάρτηση $\bar{\epsilon}$, που αποτελεί τον μέσο όρο των διηλεκτρικών συναρτήσεων του περιβάλλοντος και του υποστρώματος [330]. Μια τέτοια περιγραφή ωστόσο αναφέρεται σε ένα διαφορετικό σύστημα όπου, για παράδειγμα, προφανώς, ο κώνος φωτός είναι μετατοπισμένος, ενώ πιθανές επιφανειακές καταστάσεις και συντονισμοί που μπορεί να εμφανιστούν λόγω της διεπιφάνειας όπως είδαμε στο Εδ. 5.2, αγνοούνται. Στο Σχ. 5.12 συγκρίνουμε τα διαγράμματα διασποράς για αλυσίδες πλεγματικής σταθεράς $a_x = 50\text{nm}$, νανοκυλίνδρων διαμέτρου $D = 20\text{nm}$ και ύψους $H = 50\text{nm}$ είτε ελεύθερες είτε πάνω σε ένα υπόστρωμα SiO_2 ($\epsilon_{\text{SiO}_2} = 2.13$), υπολογισμένα με την Εξ. (2.117). Η παρουσία του υποστρώματος μετατοπίζει τις ιδιοσυχνότητες της αλυσίδας κατά περίπου 0.2eV. Υποθέτοντας ένα περιβάλλον μέσο διηλεκτρικής συνάρτησης $\bar{\epsilon} = 1.56$ το μοντέλο συζευγμένων διπόλων υπερεκτιμά σημαντικά αυτή τη μετατόπιση, όπως φαίνεται στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 5.12. Σαν αποτέλεσμα, ενώ απουσία υποστρώματος τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων συμφωνούν ικανοποιητικά, η απόκλισή τους όταν προστεθεί το υπόστρωμα είναι μεγάλη.

Κεφάλαιο 6

Περιοδικές δομές μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσάντουιτς

Μεταξύ των διάφορων νανοδομών που έχουν διερευνηθεί τα τελευταία χρόνια αναζητώντας (τεχνητό) οπτικό μαγνητισμό στην περιοχή του ορατού, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν τα μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς, ζεύγη ομοαξονικών μεταλλικών νανοδίσκων που χωρίζονται από ένα διηλεκτρικό χάρισμα, λόγω των εύκολα ρυθμισίμων πλασμαονικών συντονισμών τους. Μελέτες πολυστρωματικών δομών με εναλλασσόμενα στρώματα Au-SiO₂ έδειξαν ότι οι ισχυροί πλασμαονικοί συντονισμοί μπορούν να ρυθμιστούν μεταβάλλοντας το πάχος των διηλεκτρικών στρωμάτων [26]. Επιπλέον, έχει δείχθει ότι, όταν σε ένα ζεύγος νανοδίσκων χρυσού σε γεωμετρία σάντουιτς με ένα διηλεκτρικό χάρισμα μεταξύ τους προσπίπτει ένα επίπεδο κύμα κατάλληλης συχνότητας στο ορατό, προκαλείται σημαντική ενίσχυση του μαγνητικού πεδίου αν η απόσταση μεταξύ των δίσκων είναι οπτικά μικρή. Το φαινόμενο αυτό περιγράφεται ως ένας μαγνητικός διπολικός συντονισμός [27,331,332], και μπορεί να ενισχυθεί ακόμη περισσότερο σε περιοδικά πλέγματα [30], ειδικά αν αξιοποιηθεί και το φαινόμενο της περίθλασης μέσω κατάλληλης επιλογής της πλεγματικής σταθεράς [333]. Η συστηματική ανάλυση 2Δ πλεγμάτων από νανοσάντουιτς Au-SiO₂-Au σε υπόστρωμα έδειξε μια συμπεριφορά διπλών συντονισμών στις οπτικές συχνότητες, που προέρχονται από τον πλασμαονικό υβριδισμό. Ο βαθμός ΗΜ σύζευξης στα συστήματα αυτά μπορεί να ελεγχθεί από τον λόγο διαμέτρου/ύψος των νανοδίσκων [28,29], ενώ ο συνδυασμός τέτοιων νανοσάντουιτς με μειούμενη διάμετρο σε σχηματισμό πυραμίδας οδηγεί σε ευρυζωνικό τεχνητό μαγνητισμό [334]. Τέτοιες δομές μπορούν να παρασκευαστούν με χρήση σύγχρονων μεθόδων αυτοοργάνωσης και λιθογραφίας [26,28,335,336], και προσφέρουν εντυπωσιακές δυνατότητες ελέγχου της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας-ύλης. Επιπρόσθετα, σε αντίθεση με μεταλλικά που χρησιμοποιούν ως δομικές μονάδες μεταλλικές νανοράβδους [22], ανοιχτούς δακτυλίους [17], μεταλλικά σύρματα [21], ή ζεύγη κομμένων συρμάτων [18,19], τα οποία λειτουργούν υπό συγκεκριμένη πόλωση του ΗΜ πεδίου, τα πλέγματα μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσάντουιτς, λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας των δομικών τους μονάδων, είναι πολύ πιο ιστροπικά και προσφέρουν τη δυνατότητα σχεδιασμού μεταλλικών που δεν εξαρτώνται από την πόλωση.

Οι σωματιδιακές πλασμαονικές καταστάσεις των μεμονωμένων νανοδίσκων του νανοσάντουιτς αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, οδηγώντας σε μία συμμετρική και μία αντισυμμετρική κατάσταση, κατ' αναλογία με τον σχηματισμό δεσμικών και αντιδεσμικών υβριδικών τροχιακών στα διατομικά μόρια [162]. Υπό αυτή την οπτική γωνία, τα μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς συνιστούν μια νέα τάξη πλασμαονικών 'μετα-μορίων'. Στη συμμετρική τους οπτική κατάσταση τα ελεύθερα ηλεκτρόνια του μετάλλου ταλαντώνονται εν φάσει στους δύο δίσκους. Στην

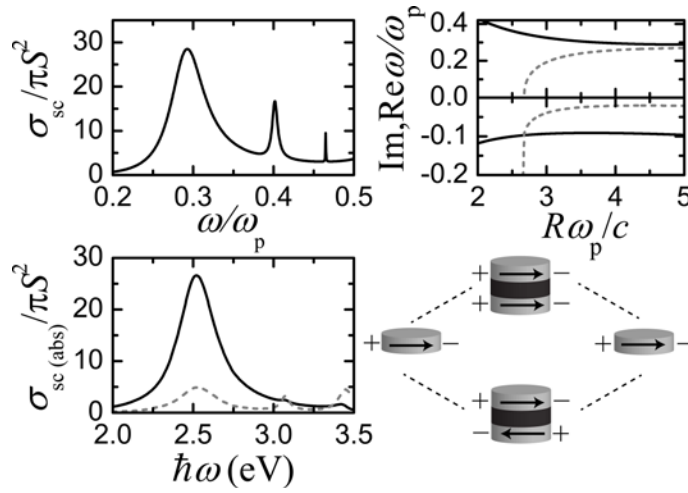
αντισυμμετρική κατάσταση τα ηλεκτρόνια ταλαντώνονται με αντίθετες φάσεις, οδηγώντας σε έναν βρόχο ρεύματος νανομετρικών διαστάσεων, που αντιστοιχεί σε μαγνητικό συντονισμό και είναι σημαντικό συστατικό στον σχεδιασμό μεταλλικών αρνητικού δείκτη διάθλασης στο ορατό και εγγύς υπέρυθρο [25,337,338]. Τέτοια μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς έχουν μελετηθεί θεωρητικά με χρήση ηλεκτροδυναμικών προσομοιώσεων με την προσέγγιση διακριτών διπόλων [26] και τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου [27–29].

Στο παρόν κεφάλαιο εξετάζουμε την οπτική απόκριση περιοδικών δομών μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσάντουιτς. Αναλύουμε τον πλασμονικό υβριδισμό και τον τρόπο με τον οποίο οι ιδιότητες του σύνθετου σωματιδίου προκύπτουν από αυτές των συστατικών του. Στη συνέχεια εξετάζουμε εξαγωνικά πλέγματα τέτοιων νανοσάντουιτς ως προς τη δυνατότητα εξομοίωσής τους με ισοδύναμο ομοιογενές μέσο με τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης (Εδ. 3.3), και την εμφάνιση εύκολα ρυθμίσιμου σε συχνότητα μαγνητικού συντονισμού [30]. Προσθέτοντας σταδιακά περισσότερα τέτοια επίπεδα, το ένα πάνω από το άλλο, σχολιάζουμε τη σύγκλιση των ισοδύναμων ΗΜ παραμέτρων με το πάχος του πλακιδίου στις αντίστοιχες τιμές για τον άπειρο κρύσταλλο [158]. Τέλος, μελετάμε τη φωτονική δομή ζωνών ενός τέτοιου άπειρου κρυστάλλου και τη δυνατότητα εξομοίωσής του με ανισοτροπικό ισοδύναμο μέσο με τη μέθοδο του Εδ. 3.4, καθώς και διαγράμματα σταθερής συχνότητας που δείχνουν ότι ο κρύσταλλος μπορεί να εμφανίζει αρνητική διάθλαση λόγω της ανισοτροπίας του [100].

6.1 Πλασμονικός υβριδισμός σε ένα μεταλλοδιηλεκτρικό νανοσάντουιτς

Η οπτική απόκριση των μεταλλικών νανοδίσκων χαρακτηρίζεται από σωματιδιακούς πλασμονικούς συντονισμούς. Στο αριστερό τμήμα του Σχ. 6.1 παρουσιάζουμε την ενεργό διατομή σκέδασης και απορρόφησης, κανονικοποιημένες στη γεωμετρική διατομή, για έναν μεταλλικό νανοδίσκο στον αέρα, στον οποίο προσπίπτει ΤΜ πολωμένο φως υπό γωνία $\theta = 45^\circ$ ως προς τον άξονά του (τον οποίο παίρνουμε κατά τη διεύθυνση z). Στο πάνω διάγραμμα ο μεταλλικός νανοδίσκος περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), χωρίς απορρόφηση ($\tau^{-1} = 0$), και έχει διάμετρο $D = 5c/\omega_p$ και πάχος $H = c/\omega_p$. Προφανώς σε αυτή την περίπτωση η ενεργός διατομή απορρόφησης είναι μηδενική. Στο σχήμα φαίνεται η διέγερση τριών πλασμονικών καταστάσεων. Οι κορυφές στις συχνότητες $0.293\omega_p$, $0.402\omega_p$, και $0.465\omega_p$, σχετίζονται με πλασμονικές καταστάσεις που αντιστοιχούν σε $m = \pm 1$, $m = \pm 2$, και $m = \pm 3$, αντίστοιχα (βλ. σχετική συζήτηση στο Εδ. 5.1). Όλες αυτές οι καταστάσεις είναι ηλεκτρικού τύπου, και έχουν κατά κύριο λόγο διπολικό, τετραπολικό, και οκταπολικό χαρακτήρα, αντίστοιχα. Στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 6.1 δείχνουμε την ενεργό διατομή σκέδασης και απορρόφησης για έναν νανοδίσκο από άργυρο, για τη διηλεκτρική συνάρτηση του οποίου χρησιμοποιούμε τις πειραματικές τιμές των Johnson και Christy [199], διαστάσεων $D = 100\text{nm}$ και $H = 20\text{nm}$. Είναι φανερό ότι στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει μόνο ο χαμηλότερος σε συχνότητα, διπολικού τύπου συντονισμός επιζεί στην ενεργό διατομή σκέδασης. Οι ανώτερες πλασμονικές καταστάσεις, που έχουν μεγαλύτερους χρόνους ζωής σε σχέση με τον χρόνο αποκατάστασης των ελεύθερων ηλεκτρονίων του μετάλλου, απορροφούνται και εκδηλώνονται ως συντονισμοί στην ενεργό διατομή απορρόφησης.

Σε ένα μεταλλοδιηλεκτρικό νανοσάντουιτς η αλληλεπίδραση μεταξύ των πλασμονικών καταστάσεων των μεμονωμένων νανοδίσκων δίνει ως αποτέλεσμα δύο νέες υβριδικές καταστά-



Σχήμα 6.1: Αριστερά: Ενεργός διατομή σκέδασης (μαύρες συνεχείς γραμμές) και απορρόφησης (γκρι διακεκομμένες γραμμές) για έναν μεταλλικό νανοδίσκο στον αέρα, για TM πολωμένο φως που προσπίπτει με γωνία $\theta = 45^\circ$ ως προς τον άξονα του δίσκου. Στο πάνω διάγραμμα ο νανοδίσκος, διαμέτρου $D = 2S = 5c/\omega_p$ και πάχους $H = c/\omega_p$, περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), με $\tau^{-1} = 0$, που σημαίνει ότι η ενεργός διατομή απορρόφησης είναι μηδενική. Στο κάτω διάγραμμα χρησιμοποιούνται οι πειραματικές τιμές για τη διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου [199], για έναν νανοδίσκο με $D = 100\text{nm}$ και $H = 20\text{nm}$. Δεξιά: Πλασμονικός υβριδισμός σε ένα μεταλλοδιηλεκτρικό νανοσάντουιτς και η εξάρτηση των μιγαδικών ιδιοσυχνοτήτων της συμμετρικής (μαύρες συνεχείς γραμμές) και αντισυμμετρικής (γκρι διακεκομμένες γραμμές) κατάστασης από την απόσταση των δύο μεταλλικών νανοδίσκων, με βάση το μοντέλο συζευγμένων διπόλων. Το μέταλλο περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude με $\tau^{-1} = 0.1\omega_p$.

σεις, μία συμμετρική, σε υψηλότερες συχνότητες, στην οποία το ηλεκτρικό πεδίο ταλαντώνεται εν φάσει στους δύο δίσκους, κάθετα στον άξονά τους, και μία αντισυμμετρική, σε χαμηλότερες συχνότητες, όπου το ηλεκτρικό πεδίο στους δύο δίσκους ταλαντώνεται με αντίθετες φάσεις. Αυτή η αντίθεση από την αναμενόμενη εικόνα, όπου η συμμετρική κατάσταση εμφανίζεται σε υψηλότερη συχνότητα και η αντισυμμετρική σε χαμηλότερη, εξηγείται ως εξής: Οι ταλαντώσεις ελεύθερων ηλεκτρονίων που σχετίζονται με τους διπολικούς συντονισμούς ηλεκτρικού τύπου στους μεμονωμένους νανοδίσκους μπορούν να εξομοιωθούν με αρμονικούς ταλαντωτές, στους οποίους οι δυνάμεις επαναφοράς εξαρτώνται από την κατανομή φορτίου. Σε ένα ζευγάρι νανοδίσκων προσανατολισμένων με τους άξονές τους παράλληλα στον άξονα που ενώνει τα κέντρα τους η κατανομή φορτίου οδηγεί σε ασθενέστερες δυνάμεις επαναφοράς για την αντισυμμετρική κατάσταση (βλ. Σχ. 6.1) και ισχυρότερες για τη συμμετρική. Συνεπώς η ιδιοσυχνότητα της αντισυμμετρικής κατάστασης βρίσκεται χαμηλότερα και της συμμετρικής υψηλότερα από ό,τι σε έναν μεμονωμένο νανοδίσκο. Ο πλασμονικός υβριδισμός σε αυτή την περίπτωση μπορεί να αναλυθεί με βάση το απλό μοντέλο συζευγμένων διπόλων. Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, το ηλεκτρικό πεδίο σε απόσταση $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ από ένα σημειακό δίπολο, διπολικής ροπής \mathbf{p} , που ταλαντώνεται με κυκλική συχνότητα ω σε περιβάλλον διηλεκτρικής

συνάρτησης ε , υποθέτοντας χρονική εξάρτηση της μορφής $\exp(-i\omega t)$, είναι

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left[(1 - iqr) \frac{3(\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{p}}{r^3} + q^2 \frac{\mathbf{p} - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p})\hat{\mathbf{r}}}{r} \right] \exp(iqr), \quad (6.1)$$

όπου $q = \omega\sqrt{\varepsilon}/c$. Για ένα ζεύγος σημειακών διπόλων, \mathbf{p}_1 και \mathbf{p}_2 , με απόσταση \mathbf{R} μεταξύ τους, απουσία εξωτερικού πεδίου, το πεδίο σε κάθε δίπολο είναι το πεδίο εξαιτίας του άλλου διπόλου. Η επαγόμενη διπολική ροπή σε κάθε δίπολο δίνεται από το γινόμενο της πολωσιμότητάς του, $\alpha_{\parallel}(\omega)$ (όπου, θυμίζουμε, με \parallel συμβολίζουμε συλλογικά τις ισοδύναμες συνιστώσες x, y), επί το πεδίο. Συνεπώς οι καταστάσεις του συστήματος με $\mathbf{p}_1 \parallel \mathbf{p}_2$ και $\mathbf{R} \perp \mathbf{p}_{1,2}$ (η διάταξη σε ένα νανοσάντουιτς) προκύπτουν από το γραμμικό σύστημα ομοιογενών εξισώσεων

$$\begin{aligned} f(\omega, R)p_1 + g(\omega, R)p_2 &= 0 \\ g(\omega, R)p_1 + f(\omega, R)p_2 &= 0, \end{aligned} \quad (6.2)$$

όπου

$$\begin{aligned} f(\omega, R) &= (1 - iqR - q^2 R^2) \exp(iqR) \\ g(\omega, R) &= \frac{R^3}{\alpha_{\parallel}(\omega)}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Προφανώς το σύστημα (6.2) έχει μία συμμετρική ($p_1 = p_2$) και μία αντισυμμετρική ($p_1 = -p_2$) λύση, για $f(\omega, R) + g(\omega, R) = 0$ και $f(\omega, R) - g(\omega, R) = 0$, αντίστοιχα. Οι εξισώσεις αυτές εξασφαλίζουν την ύπαρξη μη μηδενικής λύσης του συστήματος (6.2), και οι ρίζες τους στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο της συχνότητας ορίζουν τις ιδιοσυχνότητες της συμμετρικής και αντισυμμετρικής κατάστασης, αντίστοιχα. Στο δεξιό διάγραμμα του Σχ. 6.1 παρουσιάζουμε την εξάρτηση των ιδιοσυχνοτήτων των δύο καταστάσεων από την απόσταση R μεταξύ δύο μεταλλικών νανοδίσκων, διαμέτρου $5c/\omega_p$ και πάχους c/ω_p , θεωρώντας ότι η πολωσιμότητά τους περιγράφεται από την

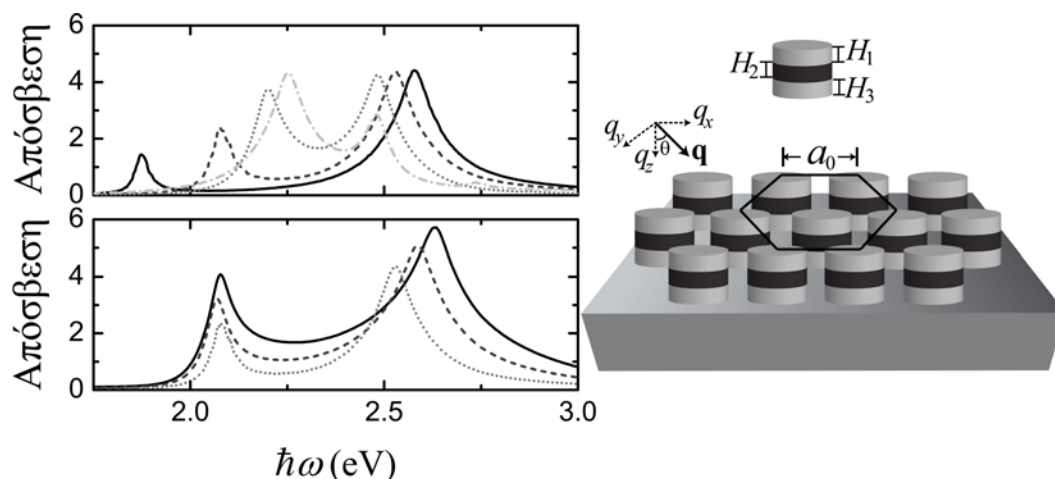
$$\alpha_{\parallel}(\omega) = \frac{V}{4\pi\varepsilon + L_{\parallel}[\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon]}. \quad (6.4)$$

Για απλότητα θεωρούμε διηλεκτρική συνάρτηση Drude, με $\tau^{-1} = 0.1\omega_p$, ώστε να ληφθούν υπόψη πλήρως οι απώλειες λόγω απορρόφησης και ακτινοβολίας. Για τον παράγοντα αποπώλωσης L_{\parallel} στην Εξ. (6.4) επιλέγουμε τιμή $L_{\parallel} = 0.08585$, ώστε να ταιριάζει με την υπολογισμένη ιδιοσυχνότητα, $\sqrt{L_{\parallel}}\omega_p = 0.293\omega_p$, του χαμηλότερου σε συχνότητα διπολικού πλασμονικού συντονισμού. Στο Σχ. 6.1 φαίνεται καθαρά μία αντισυμμετρική κατάσταση χαμηλότερης και μία συμμετρική κατάσταση υψηλότερης συχνότητας. Για μεγάλες αποστάσεις μεταξύ των δίσκων οι ιδιοσυχνότητες των δύο καταστάσεων τείνουν σε αυτήν ενός μεμονωμένου νανοδίσκου, ενώ όσο οι δίσκοι πλησιάζουν και η αλληλεπίδρασή τους αυξάνεται τόσο περισσότερο οι δύο ιδιοσυχνότητες απωθούνται.

6.2 Διδιάστατα πλέγματα και αρνητική μαγνητική διαπερατότητα

Θεωρούμε εξαγωνικά πλέγματα, πλεγματοτικής σταθεράς a_0 , από νανοσάντουιτς Ag-SiO₂-Ag σε υπόστρωμα χαλαζία (quartz) ($\varepsilon_{\text{quartz}} = 2.13$, $\mu_{\text{quartz}} = 1$), όπως αυτό που φαίνεται σχηματικά

στο Σχ. 6.2. Στα πλαίσια της μεθόδου LMS ένα τέτοιο πλέγμα σχεδιάζεται ως συνδυασμός τριών διαδοχικών επιπέδων κατάλληλων νανοδίσκων. Για τη διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου χρησιμοποιούμε τις πειραματικές τιμές των Johnson και Christy [199], ενώ για το διοξείδιο του πυριτίου παίρνουμε $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 2.13$.



Σχήμα 6.2: Σχηματική αναπαράσταση ενός εξαγωνικού πλέγματος νανοσάντουιτς Ag-SiO₂-Ag σε υπόστρωμα χαλαζία. Πάνω διάγραμμα: Φάσματα απόσβεσης για κάθετη πρόσπτωση σε εξαγωνικά πλέγματα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 250\text{nm}$, από νανοσάντουιτς Ag-SiO₂-Ag διαμέτρου $D = 100\text{nm}$ και πάχους των δίσκων αργύρου $H_1 = H_3 = 20\text{nm}$. Το πάχος του χωρίσματος SiO₂ μεταβάλλεται από $H_2 = 20\text{nm}$ (μαύρη συνεχής γραμμή) σε 40nm (σκούρα γκρι διακεκομμένη γραμμή), 80nm (γκρι εστιγμένη γραμμή) και 160nm (ανοιχτή γκρι διακεκομμένη-εστιγμένη γραμμή). Κάτω διάγραμμα: Φάσματα απόσβεσης για κάθετη πρόσπτωση σε εξαγωνικά πλέγματα από νανοσάντουιτς Ag-SiO₂-Ag με $D = 100\text{nm}$, $H_1 = H_3 = 20\text{nm}$ και $H_2 = 40\text{nm}$. Η πλεγματική σταθερά μεταβάλλεται από 170nm (μαύρη συνεχής γραμμή) σε 200nm (γκρι διακεκομμένη γραμμή) και 250nm (ανοιχτή γκρι εστιγμένη γραμμή).

Προκειμένου να μελετήσουμε τον υβριδισμό μεταξύ των σωματιδιακών πλασματικών καταστάσεων των δύο νανοδίσκων στο νανοσάντουιτς, κρατάμε σταθερή τη διάμετρο ($D = 100\text{nm}$) και το πάχος τους ($H_1 = H_3 = 20\text{nm}$), και μεταβάλλουμε το πάχος του διηλεκτρικού χωρίσματος, H_2 . Επιλέγοντας πλεγματική σταθερά $a_0 = 250\text{nm}$ η αλληλεπίδραση μεταξύ των νανοσάντουιτς του πλέγματος είναι πρακτικά αμελητέα. Τα φάσματα απόσβεσης για κάθετη πρόσπτωση παρουσιάζονται στο πάνω διάγραμμα του Σχ. 6.2. Για πολύ λεπτό διηλεκτρικό χωρίσμα το φάσμα απόσβεσης εμφανίζει μία μόνο κορυφή, η οποία ουσιαστικά είναι ο πλασματικός συντονισμός ενός πλέγματος απλών μεταλλικών νανοδίσκων πάχους 40nm . Αντίθετα, όταν η απόσταση μεταξύ των δύο δίσκων είναι αρκετά μεγαλύτερη (τυπικά μεγαλύτερη των 10nm), τα φάσματα χαρακτηρίζονται από δύο διακριτές κορυφές. Αυξάνοντας το πάχος του διηλεκτρικού χωρίσματος, η υψηλότερης συχνότητας κορυφή μετατοπίζεται σε μικρότερες συχνότητες, ενώ η χαμηλότερης συχνότητας κορυφή μετατοπίζεται προς μεγαλύτερες συχνότητες και γίνεται πιο ισχυρή. Τα αποτελέσματα αυτά συμφωνούν με σχετικά πειραματικά

δεδομένα για μεμονωμένα νανοσάντουιτς [26, 28] και ερμηνεύονται ως εξής: Η δομή διπλής κορυφής στο φάσμα απόσβεσης προέρχεται από την ασθενή αλληλεπίδραση των αντίστοιχων υβριδικών πλασματικών καταστάσεων των μεμονωμένων νανοσάντουιτς. Η μετατόπιση στη συχνότητα είναι μεγαλύτερη για την αντισυμμετρική κατάσταση, σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του μοντέλου συζευγμένων διπόλων του Σχ. 6.1. Επιπλέον, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.1, ενώ το φανταστικό μέρος της ιδιοσυχνότητας της συμμετρικής κατάστασης παραμένει πρακτικά σταθερό, η ιδιοσυχνότητα της αντισυμμετρικής κατάστασης απομακρύνεται ταχύτατα από τον πραγματικό άξονα προς το κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο της συχνότητας, που σημαίνει δραστηκή μείωση του χρόνου ζωής αυτής της κατάστασης καθώς η απόσταση μεταξύ των νανοδίσκων μειώνεται. Επιπλέον, η αλληλεπίδραση μεταξύ των νανοσάντουιτς στο πλέγμα, που αυξάνεται καθώς μειώνουμε την πλεγματική σταθερά, εκδηλώνεται με ισχυρότερες σε ένταση και μετατοπισμένες σε συχνότητα κορυφές στο φάσμα απόσβεσης, όπως φαίνεται στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 6.2.

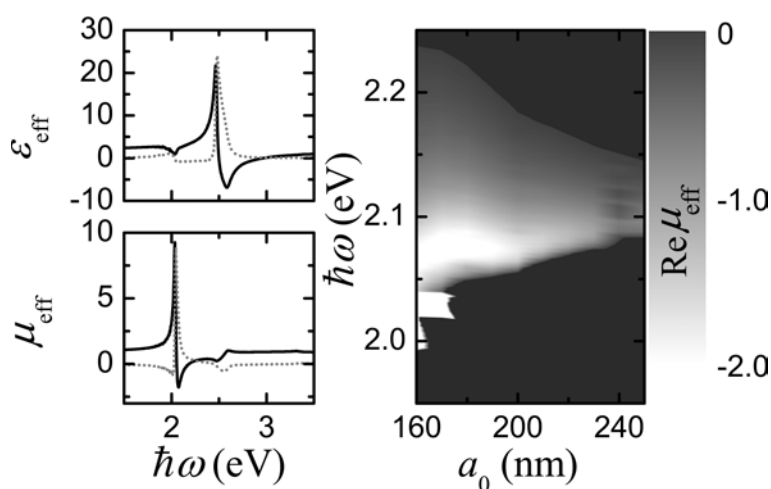
Στην περίπτωση των επίπεδων δομών που μελετάμε, για τη χρήση του μοντέλου συζευγμένων διπόλων του Εδ. 6.1 απαιτείται ο υπολογισμός του πεδίου για ένα δεδομένο δίπολο \mathbf{p}_0 , ο οποίος περιλαμβάνει ένα άπειρο άθροισμα σε όλα τα υπόλοιπα δίπολα \mathbf{p}_n στις θέσεις $\mathbf{R}_n \neq \mathbf{0}$. Λόγω της περιοδικότητας της δομής, η παράλληλη στο επίπεδο των νανοσάντουιτς και ανηγμένη στην ΕΖΒ του δεδομένου 2Δ πλέγματος συνιστώσα του κυματανύσματος, \mathbf{k}_{\parallel} , διατηρείται. Λαμβάνοντας υπόψη το θεώρημα Bloch, $\mathbf{p}_n = \mathbf{p}_0 \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)$ και υποθέτοντας ότι οι συντονισμοί των μεμονωμένων νανοσάντουιτς μπορούν να περιγραφούν πλήρως από συναρτήσεις ηλεκτρικής ή μαγνητικής πολωσιμότητας, καταλήγουμε σε μια καταστατική εξίσωση που δίνει τις μιγαδικές ιδιοσυχνότητες του συστήματος για δεδομένο \mathbf{k}_{\parallel} [339, 340]. Εν γένει, παίρνει κανείς δύο σχετικά στενές ζώνες καταστάσεων συντονισμού, $\omega(\mathbf{k}_{\parallel})$, γύρω από τις ιδιοσυχνότητες της αντισυμμετρικής και συμμετρικής κατάστασης, αντίστοιχα, του μεμονωμένου νανοσάντουιτς. Οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$ είναι αυτές που διεγείρονται σε κάθετη πρόσπτωση. Μειώνοντας την πλεγματική σταθερά της δομής, η αυξανόμενη ισχύς της σύζευξης οδηγεί σε μεγαλύτερο εύρος ζώνης [341] και κατά συνέπεια σε αντίστοιχη μετατόπιση της $\omega(\mathbf{0})$, που ερμηνεύει τις μετατοπίσεις των κορυφών συντονισμού στο κάτω διάγραμμα του Σχ. 6.2. Αξίζει να σημειωθεί ότι, ενώ οι αλληλεπιδράσεις κοντινού πεδίου παίζουν τον κυρίαρχο ρόλο στη σύζευξη των πλησιέστερων γειτόνων για μικρές πλεγματικές σταθερές, οι αλληλεπιδράσεις με πιο απομακρυσμένους γείτονες μπορεί να είναι επίσης σημαντικές [320].

Προκειμένου να δώσουμε μια ποσοτική περιγραφή της μαγνητικής φύσης του αντισυμμετρικού συντονισμού στα πλέγματα που εξετάζουμε, καταφεύγουμε στην ομοιογενοποίηση των πλεγμάτων με τη μέθοδο αντίστροφης σχέδασης. Η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ_{eff} , και μαγνητική διαπερατότητα, μ_{eff} , υπολογίζονται με αντιστροφή των εξισώσεων του Fresnel, λαμβάνοντας υπόψη το υπόστρωμα, όπως περιγράψαμε στο Εδ. 3.3. Για κάθετη πρόσπτωση, η ισοδύναμη εμπέδηση και ο ισοδύναμος δείκτης διάθλασης προκύπτουν από τις σχέσεις

$$z_{\text{eff}} = \pm \frac{\sqrt{(r-1)^2 - t^2}}{\sqrt{(r+1)^2 z_3^2 - t^2 z_1^2}} z_1 z_3 \quad (6.5)$$

και

$$\tan(\beta/2) = \pm i \sqrt{\frac{(r-1+t)[z_3(r+1) - tz_1]}{(r-1-t)[z_3(r+1) + tz_1]}} \quad (6.6)$$



Σχήμα 6.3: Αριστερά διαγράμματα: Το πραγματικό (συνεχείς γραμμές) και φανταστικό (εστιγμένες γραμμές) μέρος της ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης, ϵ_{eff} (πάνω), και μαγνητικής διαπερατότητας, μ_{eff} (κάτω), για ένα εξαγωνικό πλέγμα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 200\text{nm}$, από νανοσαντούιτς Ag-SiO₂-Ag διαμέτρου $D = 100\text{nm}$ με πάχη $H_1 = H_3 = 20\text{nm}$ και $H_2 = 40\text{nm}$, σε υπόστρωμα χαλαζία. Δεξιά διάγραμμα: Αρνητική μαγνητική διαπερατότητα συναρτήσει της πλεγματικής σταθεράς εξαγωνικών πλεγμάτων των παραπάνω νανοσαντούιτς.

αντίστοιχα, όπου $\beta = \omega n_{\text{eff}} h/c$, με h το πάχος του ισοδύναμου ομοιογενούς πλακιδίου. Οι δείκτες '1' και '3' αναφέρονται στο περιβάλλον μέσο (αέρα) και το υπόστρωμα, αντίστοιχα. Το πρόσημο της Εξ. (6.5) καθορίζεται από την απαίτηση $\text{Re}z_2 > 0$, που πρέπει να ισχύει σε ένα υλικό με απώλειες. Επιπλέον, για να εξασφαλιστεί η εκθετικά φθίνουσα συμπεριφορά του εξερχόμενου κύματος, πρέπει να ισχύει $\text{Im}\beta > 0$, απαίτηση που καθορίζει το πρόσημο της Εξ. (6.6). Η ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση και μαγνητική διαπερατότητα του πλακιδίου δίνονται τότε από τις $\epsilon_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}/z_{\text{eff}}$ και $\mu_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}z_{\text{eff}}$.

Στο Σχ. 6.3 δείχνουμε τις ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους που υπολογίστηκαν με αυτό τον τρόπο για ένα εξαγωνικό πλέγμα, πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 200\text{nm}$, από νανοσαντούιτς Ag-SiO₂-Ag διαμέτρου $D = 100\text{nm}$, με πάχη $H_1 = H_3 = 20\text{nm}$ και $H_2 = 40\text{nm}$, σε υπόστρωμα χαλαζία. Ως πάχος του ισοδύναμου ομοιογενούς πλακιδίου είναι λογικό να θεωρήσουμε το συνολικό πάχος των νανοσαντούιτς, $h = 80\text{nm}$, αν και άλλες επιλογές με $h > 80\text{nm}$ δεν τροποποιούν σημαντικά τα αποτελέσματά μας. Στο Σχ. 6.3 παρατηρούμε έναν ισχυρό συντονισμό στη μαγνητική διαπερατότητα, στην περιοχή συχνοτήτων της αντισυμμετρικής κατάστασης, και έναν αντίστοιχο συντονισμό στη διηλεκτρική συνάρτηση, στην περιοχή της συμμετρικής κατάστασης. Οι συντονισμοί αυτοί συνοδεύονται από μικρούς αντισυντονισμούς της άλλης συνάρτησης απόκρισης, όπως συζητήσαμε στο Εδ. 3.3. Στην περιοχή μεταξύ 2.05eV και 2.18eV η μαγνητική διαπερατότητα είναι αρνητική, με τιμή που φτάνει μέχρι το -1.77 , ενώ αντίστοιχα η διηλεκτρική συνάρτηση γίνεται αρνητική στην περιοχή μεταξύ 2.50eV και 2.97eV. Οι αρνητικές αυτές τιμές, ωστόσο, συνοδεύονται από αρκετά ισχυρές απώλειες, με το φανταστικό μέρος του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης να παίρνει τιμές μέχρι και 2.5. Πρέπει

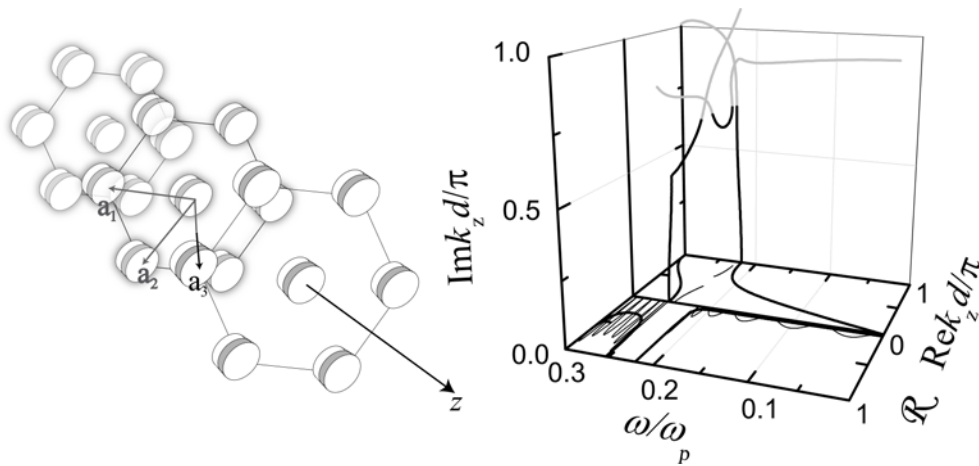
βέβαια να τονιστεί ξανά ότι οι παράμετροι που υπολογίζονται με αυτή τη μέθοδο δεν μπορούν να θεωρηθούν παράμετροι που χαρακτηρίζουν το υλικό, αλλά μάλλον το διερχόμενο κύμα, και αναφέρονται σε πρόσπτωση υπό συγκεκριμένη γωνία (κάθετη πρόσπτωση στην περίπτωση μας) σε πλακίδιο συγκεκριμένου πάχους. Τα αντίστοιχα φάσματα διέλευσης χαρακτηρίζονται από δύο τοπικά ελάχιστα, μέχρι 4% και 0.5%, κοντά στις συχνότητες συντονισμού της αντισυμμετρικής και συμμετρικής κατάστασης, αντίστοιχα. Όπως αναμένεται, στις θέσεις αυτές παίρνουμε ενισχυμένη απορρόφηση, της τάξης του 40% και 16%, αντίστοιχα.

Στο δεξιό διάγραμμα του Σχ. 6.3 δείχνουμε το πραγματικό μέρος της ισοδύναμης μαγνητικής διαπερατότητας, $\text{Re}\mu_{\text{eff}}$, συναρτήσεως της πλεγματικής σταθεράς των εξαγωνικών πλεγμάτων που περιγράψαμε πιο πάνω, στην περιοχή όπου $\text{Re}\mu_{\text{eff}} < 0$. Όπως αναφέραμε ήδη, μειώνοντας την πλεγματική σταθερά η αλληλεπίδραση μεταξύ των νανοσάντουιτς γίνεται ισχυρότερη, δίνοντας πιο έντονους συντονισμούς και πιο αρνητικές τιμές της $\text{Re}\mu_{\text{eff}}$ σε ευρύτερη περιοχή συχνοτήτων.

6.3 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου

Θεωρούμε τώρα έναν άπειρο φωτονικό κρύσταλλο ως επαλληλία εξαγωνικών επιπέδων νανοσάντουιτς, των οποίων το μεταλλικό μέρος περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (3.1), χωρίς απορρόφηση ($\tau^{-1} = 0$) προς το παρόν. Οι μεταλλικοί δίσκοι έχουν διάμετρο $D = 5c/\omega_p$ και πάχος $H_1 = H_3 = c/\omega_p$, ενώ το διηλεκτρικό χώρισμα (SiO_2) έχει πάχος $H_2 = 2c/\omega_p$. Συνεπώς $H = H_1 + H_2 + H_3 = 4c/\omega_p$ είναι το συνολικό πάχος των νανοσάντουιτς. Σε κάθε επίπεδο, τα νανοσάντουιτς είναι διατεταγμένα σε εξαγωνικά πλέγματα που ορίζονται από τα διανύσματα $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0, 0)$ και $\mathbf{a}_2 = a_0(1/2, \sqrt{3}/2, 0)$, με $a_0 = 10c/\omega_p$, ενώ το διάνυσμα $\mathbf{a}_3 = (a_0/2, a_0\sqrt{3}/6, H)$ μας μεταφέρει από το ένα επίπεδο στο επόμενο, ώστε η συνολική απόσταση μεταξύ διαδοχικών επιπέδων να είναι $d = H$. Μια σχηματική εικόνα της παραπάνω δομής φαίνεται στο Σχ. 6.4.

Η μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κατά μήκος της διεύθυνσης ανάπτυξης του (διεύθυνση [001]), στην περιοχή συχνοτήτων μέχρι και τον αντισυμμετρικό συντονισμό, παρουσιάζεται στο Σχ. 6.4. Σε χαμηλές συχνότητες παίρνουμε μια διπλά εκφυλισμένη γραμμική σχέση διασποράς, όπως αναμένεται για διάδοση σε ομοιογενές μέσο. Η ζώνη αυτή αλληλεπιδρά με τη στενή διπλά εκφυλισμένη ζώνη που προέρχεται από τις αντισυμμετρικές καταστάσεις των μεμονωμένων νανοσάντουιτς και ως αποτέλεσμα ανοίγει ένα χάσμα υβριδισμού. Στην περιοχή του χάσματος, όπου δεν υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου, οι ζώνες συνεχίζουν αναλυτικά στο μιγαδικό ημιεπίπεδο k_z [151]. Στην περιοχή αυτή δείχνουμε τις σχέσεις διασποράς για μιγαδικές τιμές του k_z που αντιστοιχούν στις διπλά εκφυλισμένες ζώνες. Η ζώνη που έχει σε κάθε συχνότητα το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος είναι αυτή που καθορίζει τη διάδοση του φωτός στον κρύσταλλο κατά μήκος της δεδομένης διεύθυνσης, και παρουσιάζεται με μαύρο χρώμα. Τέτοιες μιγαδικές ζώνες έχουν μελετηθεί στο παρελθόν για την περιγραφή της ηλεκτρονικής δομής ζωνών κρυσταλλικών στερεών [342], και υπακούουν σε μια σειρά από ενδιαφέροντα θεώρηματα, όπως για παράδειγμα ότι είναι αύξουσες με τη συχνότητα, τα οποία εφαρμόζονται και στις φωτονικές ζώνες. Σημειώνουμε ότι, αν λάβουμε υπόψη τις απορροφήσεις θέτοντας μη μηδενικό αντίστροφο χρόνο αποκατάστασης στην Εξ. (3.1), όλες οι ζώνες αποκτούν ένα (μικρό) φανταστικό μέρος και σηκώνονται στο μιγαδικό επίπεδο k_z .

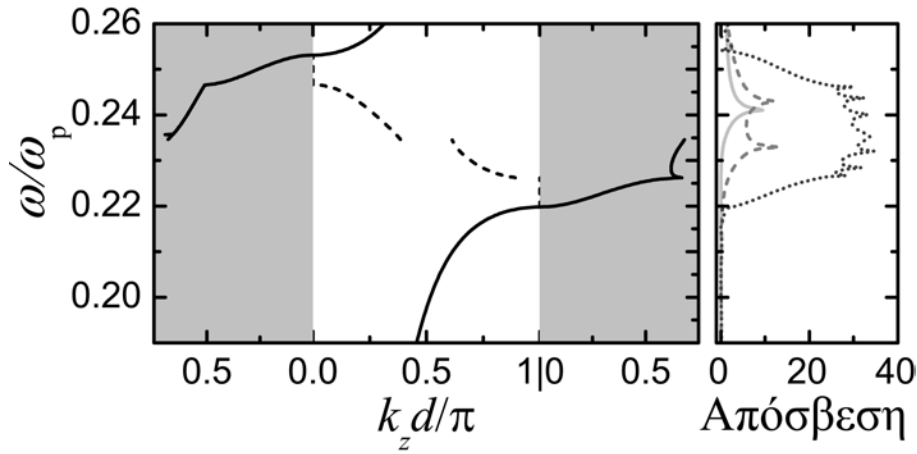


Σχήμα 6.4: Σχηματική αναπαράσταση του φωτονικού κρυστάλλου μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσαντούιτς που εξετάζουμε, και η φωτονική δομή ζωνών του κατά μήκος της διεύθυνσης [001], αγνοώντας τις απώλειες λόγω απορρόφησης. Τα τμήματα των (διπλά εκφυλισμένων) μιγαδικών ζωνών με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος στην περιοχή του χάσματος παρουσιάζονται με χοντρές μαύρες γραμμές. Οι λεπτές γραμμές παριστούν τις προβολές αυτών των ζωνών στο επίπεδο $\omega - \text{Re}k_z$. Δίπλα στο διάγραμμα ζωνών δείχνουμε τον συντελεστή ανάκλασης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα πλακίδιο από οκτώ (001) επίπεδα του κρυστάλλου (λεπτή γραμμή), καθώς και τον συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου (χοντρή γραμμή).

Στο Σχ. 6.4 δίπλα στο διάγραμμα ζωνών δείχνουμε τον συντελεστή ανάκλασης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο του κρυστάλλου αποτελούμενο από οκτώ επίπεδα από νανοσαντούιτς, καθώς και τον αντίστοιχο συντελεστή ανάκλασης για τον ημιάπειρο κρύσταλλο. Ο συντελεστής ανάκλασης του πεπερασμένου πλακιδίου εμφανίζει τις γνωστές ταλαντώσεις Fabry-Perot λόγω πολλαπλών ανακλάσεων στις επιφάνειες του πλακιδίου. Η περίοδός τους αντιστοιχεί σε $k_z d/\pi = 1/8$, όπως αναμένεται για το συγκεκριμένο πάχος. Ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου, όπως συζητήσαμε σε προηγούμενα κεφάλαια, δεν εμφανίζει τέτοιες ταλαντώσεις διότι δεν υπάρχει πίσω επιφάνεια για να προκαλέσει πολλαπλές ανακλάσεις. Στην περιοχή του χάσματος δεν υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις του HM πεδίου, το οποίο υφίσταται ολική ανάκλαση και ο συντελεστής ανάκλασης γίνεται ίσος με τη μονάδα.

6.4 Ομοιογενοποίηση πλακιδίων και άπειρου κρυστάλλου

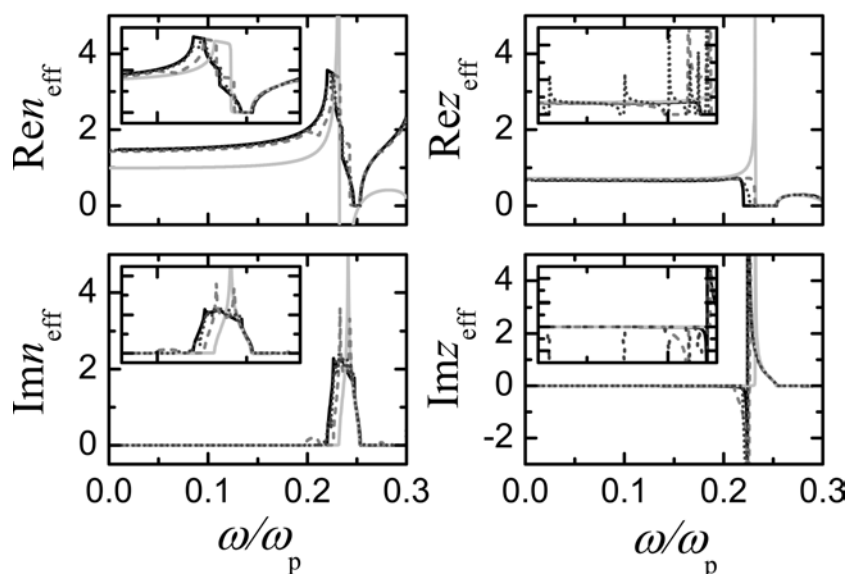
Στο Εδ. 6.2 εφαρμόσαμε τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης του Εδ. 3.3 για να υπολογίσουμε τις ισοδύναμες παραμέτρους ενός εξαγωνικού πλέγματος από νανοσαντούιτς χρησιμοποιώντας τη ρεαλιστική διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου. Προκειμένου να εξετάσουμε τη συμπεριφορά πλακιδίων μεγαλύτερου πάχους, που αποτελούνται από περισσότερα του ενός επίπεδα, αξιοποιώντας όλα τα εργαλεία βελτίωσης της μεθόδου που αναπτύξαμε στο Εδ. 3.3 (μιγαδική δομή ζωνών, συντελεστής ανάκλασης ημιάπειρου κρυστάλλου), αλλά και να γενικεύσουμε την



Σχήμα 6.5: Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 6.4 στην περιοχή του χάσματος και ο συντελεστής απόσβεσης για κάθετη πρόσπτωση σε πλακίδια αποτελούμενα από ένα (ανοιχτή γκρι συνεχής γραμμή), δύο (γκρι διακεκομμένη γραμμή) και οκτώ (σκούρα γκρι εστιγμένη γραμμή) (001) επίπεδα του κρυστάλλου.

περιγραφή για ένα οποιοδήποτε μέταλλο, θα καταφύγουμε στη διηλεκτρική συνάρτηση Drude και τον κρύσταλλο που παρουσιάσαμε στο Σχ. 6.4. Στην περίπτωση αυτή οι διαστάσεις των σωματιδίων και οι αποστάσεις μεταξύ τους είναι αρκετά μικρότερες από το μήκος κύματος στο κενό ώστε να έχει νόημα μια μέθοδος ομοιογενοποίησης ($20c/\omega_p \lesssim \lambda < \infty$), ενώ επιπλέον υπάρχει μία μόνο κυρίαρχη κατάσταση Bloch, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.4. Δεδομένου ότι η απόσταση μεταξύ των διαδοχικών επιπέδων, d , είναι ίση με το πάχος των νανοσαντούιτς, H , είναι λογικό να θεωρήσουμε το H ως το πάχος ενός ισοδύναμου ομοιογενούς πλακιδίου αποτελούμενου από ένα επίπεδο. Με τον ίδιο τρόπο θεωρούμε ότι το πάχος ενός πλακιδίου από N_L επίπεδα θα είναι $HN_L = 4N_L c/\omega_p$.

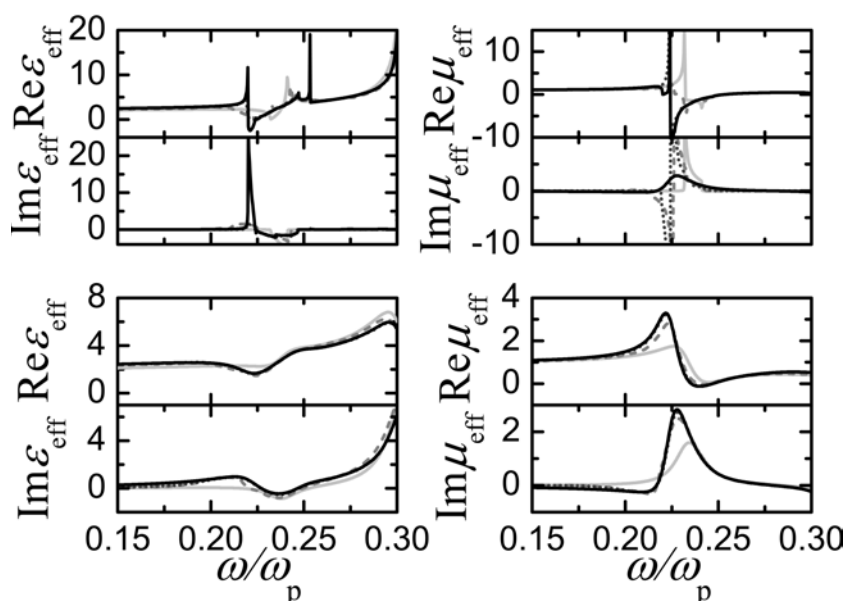
Εφαρμόζουμε τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης για πλακίδια αποτελούμενα από ένα, δύο, και οκτώ επίπεδα του κρυστάλλου. Όπως έχουμε συζητήσει στο Κεφ. 3, κατά τον υπολογισμό του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης υπάρχει ασάφεια στον προσδιορισμό του σωστού κλάδου μιας πλειονότιμης συνάρτησης, της εφαιπτομένης. Για πλακίδια αποτελούμενα από ένα επίπεδο συνήθως πρέπει να επιλεγεί ο θεμελιώδης κλάδος. Αυξάνοντας τον αριθμό των επιπέδων, ωστόσο, οι ανώτεροι κλάδοι μπορεί να υπεισέλθουν και αυτοί. Επιπρόσθετα, πιθανές ασυνέχειες λόγω του συντονισμού μπορεί να κάνουν την κατάσταση πιο πολύπλοκη. Οι δυσκολίες αυτές αίρονται αν χρησιμοποιήσουμε ως οδηγό τον δείκτη διάθλασης που εξάγεται από το διάγραμμα μιγαδικής φωτονικής δομής ζωνών του αντίστοιχου άπειρου κρυστάλλου, $n_{\text{eff}} = c(\text{Re}k_z + i\text{Im}k_z)/\omega$, που υπολογίζεται με σαφήνεια. Έχει ενδιαφέρον ότι στην περιοχή του χάσματος το πραγματικό μέρος του δείκτη διάθλασης μεταβάλλεται κλιμακωτά, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.6, και αντίστοιχες κορυφές εμφανίζονται στο $\text{Im}n_{\text{eff}}$, όσες και τα επίπεδα από τα οποία αποτελείται το πλακίδιο. Αυτές οι δομές, που έχουν παρατηρηθεί και από άλλους [47] σχετίζονται με συντονισμούς μέσα στο χάσμα [147, 151]. Φυσικά, δεν μπορούν να αποτελέσουν καταστάσεις του HM πεδίου για τον άπειρο κρύσταλλο· σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο



Σχήμα 6.6: Πραγματικό και φανταστικό μέρος του ισοδύναμου δείκτη διάθλασης και της ισοδύναμης εμπέδησης για πλακίδια αποτελούμενα από ένα (ανοιχτές γκρι συνεχείς γραμμές), δύο (γκρι διακεκομμένες γραμμές) και οκτώ (σκούρες γκρι εστιγμένες γραμμές) επίπεδα (001) του κρυστάλλου του Σχ. 6.4. Η συνεχής μαύρη γραμμή δείχνει τα αποτελέσματα για τον αντίστοιχο άπειρο κρύσταλλο. Στα ένθετα δείχνουμε μεγεθύνσεις των αντίστοιχων διαγραμμάτων σε περιοχές ιδιαίτερου ενδιαφέροντος.

όμως μπορούν να υπάρχουν ως φθίνοντα κύματα και οδηγούν σε συντονισμούς με μεγαλύτερη ένταση στις επιφάνειες του πλακιδίου και μικρότερη στο μέσο του. Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτοί οι συντονισμοί εμφανίζονται σε συχνότητες που αντιστοιχούν σε $\text{Re}k_z d/\pi = \kappa/(N_L + 1)$, $\kappa = 1, 2, \dots, N_L$, όπου N_L είναι ο αριθμός των επιπέδων του πλακιδίου. Αυτό φαίνεται καθαρά στο Σχ. 6.5, όπου παρουσιάζουμε τη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου μαζί με τον συντελεστή απόσβεσης για πλακίδια αποτελούμενα από ένα, δύο, και οκτώ επίπεδα, εστιάζοντας στην περιοχή του χάσματος. Δεδομένου ότι η μέθοδος ομοιογενοποίησης μέσω του πίνακα \mathbf{S} ορίζει τις ισοδύναμες παραμέτρους έτσι ώστε να αναπαράγεται ακριβώς το φάσμα διέλευσης, αυτοί οι συντονισμοί εντός του χάσματος εκδηλώνονται ως ξεχωριστές δομές στον δείκτη διάθλασης. Καθώς προστίθενται επίπεδα για να χτιστεί ο άπειρος κρύσταλλος, οι δομές αυτές πλησιάζουν μεταξύ τους και γίνονται λιγότερο έντονες, οδηγώντας στον ομαλό δείκτη διάθλασης που προσδιορίζεται από το διάγραμμα ζωνών του άπειρου κρυστάλλου. Οι δομές αυτές προφανώς γίνονται ακόμα πιο ήπιες όταν ληφθεί υπόψη και η απορρόφηση.

Από την άλλη, στον υπολογισμό της ισοδύναμης εμπέδησης, z_{eff} , των πλακιδίων που εξετάζουμε, εμφανίζονται αφύσικες δομές συντονισμού στις θέσεις των συντονισμών Fabry-Perot, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.6. Οι δομές αυτές οφείλονται στο πάχος του πλακιδίου, και συγκεκριμένα στους συντονισμούς Fabry-Perot, όπως εξηγήσαμε στο Εδ. 3.3. Προκειμένου να απαλλαγούμε από αυτές τις δομές καταφεύγουμε στην ισοδύναμη εμπέδηση του ημιάπειρου κρυστάλλου, που προκύπτει από τον αντίστοιχο μιγαδικό συντελεστή ανάκλασης από τη σχέ-

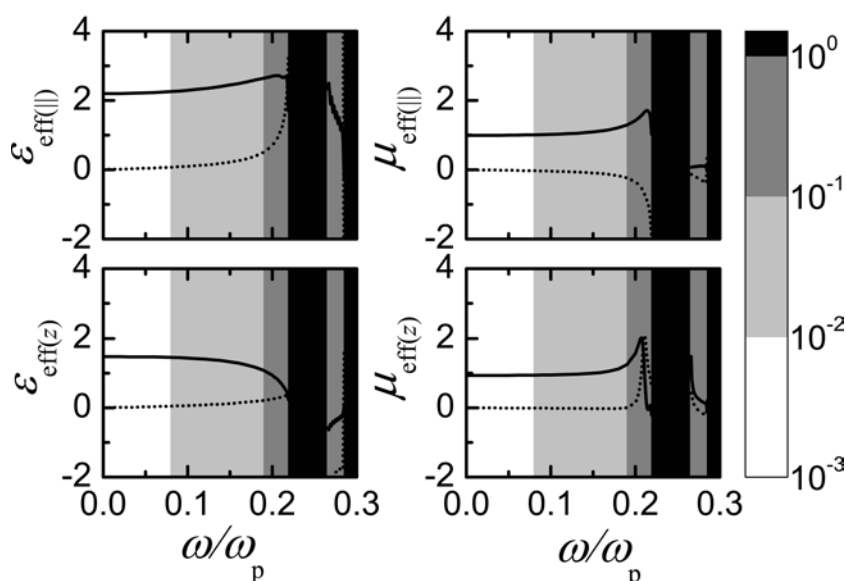


Σχήμα 6.7: Ισοδύναμη διηλεκτρική συνάρτηση και μαγνητική διαπερατότητα για πλακίδια αποτελούμενα από ένα (ανοιχτές γκρι συνεχείς γραμμές), δύο (γκρι διακεκομμένες γραμμές), και οκτώ (σκούρες γκρι εστιγμένες γραμμές) επίπεδα από νανοςάντουιτς, καθώς και οι αντίστοιχες συναρτήσεις απόκρισης για το άπειρο μεταϊλικό (μαύρες συνεχείς γραμμές), αγνοώντας (πάνω διαγράμματα) ή λαμβάνοντας υπόψη (κάτω διαγράμματα) τις απώλειες λόγω απορρόφησης.

ση $z_\infty = z(1 + r_\infty)/(1 - r_\infty)$, όπου z είναι η εμπέδηση του περιβάλλοντος. Προφανώς, η z_∞ δεν εμφανίζει τέτοιες δομές, μια και δεν υπάρχει πίσω επιφάνεια για να δημιουργήσει τις πολλαπλές ανακλάσεις στις οποίες οφείλονται οι συντονισμοί Fabry-Perot.

Στο Σχ. 6.7 δείχνουμε τις ισοδύναμες διηλεκτρικές συναρτήσεις, ϵ_{eff} , και μαγνητικές διαπερατότητες, μ_{eff} , όπως προκύπτουν από τα z_{eff} και n_{eff} ($\epsilon_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}/z_{\text{eff}}$ και $\mu_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}z_{\text{eff}}$), για πλακίδια πάχους ενός, δύο, και οκτώ επιπέδων από νανοςάντουιτς, καθώς και για το άπειρο μεταϊλικό, τόσο απουσία απορρόφησης όσο και θεωρώντας μια σχετικά μεγάλη τιμή για τον αντίστροφο χρόνο αποκατάστασης, $\tau^{-1} = 0.025\omega_p$. Παρατηρούμε έντονους συντονισμούς στην ισοδύναμη μαγνητική διαπερατότητα, που είναι το αποτύπωμα του τεχνητού οπτικού μαγνητισμού, συνοδευόμενος από αντισυντονισμούς στη διηλεκτρική συνάρτηση. Είναι ενδιαφέρον ότι οι ισοδύναμες παράμετροι συγκλίνουν ταχύτατα με το πάχος του πλακιδίου, και ήδη ένα πλακίδιο από δύο επίπεδα συμπεριφέρεται σαν το άπειρο μεταϊλικό. Τέλος, αξίζει να αναφέρουμε ότι οι ισοδύναμες παράμετροι που υπολογίστηκαν είναι ανεξάρτητες από την πόλωση (δεδομένης της κάθετης πρόσπτωσης), όπως αναμένεται από τη συμμετρία της δομής.

Στην πραγματικότητα, ο κρύσταλλος που εξετάζουμε δεν μπορεί να θεωρηθεί ιστροπικός, αλλά έχει μονοαξονική συμμετρία. Κατά συνέπεια, για μια ακριβέστερη περιγραφή της οπτικής απόκρισής του θα πρέπει να υπολογιστούν ταυσιακές και όχι βαθμωτές ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι, της μορφής (4.19). Όπως περιγράψαμε και στα προηγούμενα κεφάλαια, μέσω προσαρμογών ελαχίστων τετραγώνων σε δεδομένα για τη μιγαδική δομή ζωνών του άπειρου κρυστάλλου και τον συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου στις Εξ. (4.20) (4.21)



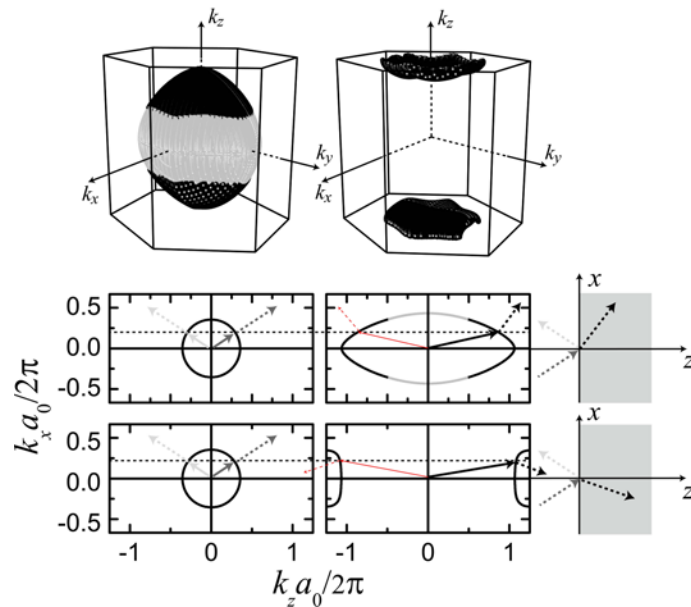
Σχήμα 6.8: Τανυστές ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας για τον κρύσταλλο του Σχ. 6.4, υπολογισμένοι με τη μέθοδο ομοιογενοποίησης άπειρου κρυστάλλου. Με συνεχείς και εστιγμένες γραμμές δείχνουμε το πραγματικό και φανταστικό μέρος κάθε στοιχείου των τανυστών, αντίστοιχα. Η τυπική απόκλιση της διαδικασίας προσαρμογής που υπεισέρχεται στην ομοιογενοποίηση παρουσιάζεται σε λογαριθμική κλίμακα, σε αποχρώσεις του γκρι.

και (4.22), (4.23) αντίστοιχα, υπολογισμένα και για τις δύο καταστάσεις πόλωσης και για πολλές γωνίες, παίρνουμε τιμές για τις παραμέτρους $\mu_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(z)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}$ (δύο τιμές), $\mu_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(z)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, και $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}/\mu_{\text{eff}(\parallel)}$ (δύο τιμές). Από αυτές τις τιμές καταστρώνουμε ένα σύστημα οκτώ εξισώσεων για τις τέσσερις τιμές $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$, $\varepsilon_{\text{eff}(z)}$, $\mu_{\text{eff}(\parallel)}$, και $\mu_{\text{eff}(z)}$, το οποίο επιλύουμε με μια δεύτερη διαδικασία προσαρμογής, για να πάρουμε τις ισοδύναμες παραμέτρους που δείχνουμε στο Σχ. 6.8. Στην ειδική περίπτωση της κάθετης πρόσπτωσης, τα μόνα στοιχεία των τανυστών ισοδύναμης διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας που υπεισέρχονται είναι τα $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}$ και $\mu_{\text{eff}(\parallel)}$, τα οποία, όπως θα περιμέναμε, έξω από το χάσμα συμφωνούν καλά με τους αντίστοιχους υπολογισμούς με τη μέθοδο αντίστροφης σκέδασης για πεπερασμένα πλακίδια. Μέσα στο χάσμα, όπως έχουμε πει, οι ισοδύναμες παράμετροι χάνουν το νόημά τους και οι διαδικασίες προσαρμογής αποτυγχάνουν τελείως, ενώ η τυπική απόκλιση είναι μεγάλη και κοντά στα όρια της ΖΒ όπου η περιγραφή με όρους τοπικών συναρτήσεων απόκρισης είναι αμφίβολη.

6.5 Αρνητική διάθλαση

Παρότι τα αποτελέσματα της διαδικασίας ομοιογενοποίησης με βάση τον άπειρο κρύσταλλο είναι αμφίβολης ακρίβειας στην περιοχή από $0.2\omega_p$ μέχρι και το χάσμα (σκούρα γκρι σκιασμένη περιοχή στο Σχ. 6.8), το βασικό χαρακτηριστικό που χρήζει περαιτέρω ανάλυσης είναι ο

συντονισμός της $\mu_{\text{eff}(z)}$, η οποία παίρνει (μικρές) αρνητικές τιμές ακριβώς πριν το χάσμα, ενώ τα υπόλοιπα στοιχεία των τανυστών διηλεκτρικής συνάρτησης και μαγνητικής διαπερατότητας είναι θετικά, συμπεριφορά που χαρακτηρίζει τα αόριστα μέσα (βλ. Εδ. 1.2). Αναμένουμε λοιπόν ότι σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων ο κρύσταλλος θα συμπεριφέρεται ως αόριστο μέσο και θα εμφανίζει αρνητική διάθλαση. Για να επιβεβαιώσουμε αυτή τη συμπεριφορά υπολογίζουμε τις επιφάνειες σταθερής συχνότητας, για τις καταστάσεις με πόλωση τύπου TE και TM, σε συχνότητα $0.219\omega_p$. Στο Σχ. 6.9 φαίνεται ότι, ενώ για πόλωση τύπου TM η επιφάνεια σταθερής συχνότητας είναι ελλειψοειδής, όπως αναμένεται από την Εξ. (4.21) για ένα μέσο με θετικά τα γινόμενα $\varepsilon_{\text{eff}(\parallel)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}$ και $\varepsilon_{\text{eff}(z)}\mu_{\text{eff}(\parallel)}$, για πόλωση τύπου TE η επιφάνεια σταθερής συχνότητας, αν και δεν είναι τέλειο υπερβολοειδές, έχει ωστόσο αρνητική καμπυλότητα. Στο σχήμα, κατά τα συνήθη, με ανοιχτό γκρι χρώμα συμβολίζουμε τις περιοχές του \mathbf{k}_{\parallel} που αντιστοιχούν σε φθίνοντα κύματα στο περιβάλλον (αέρα).



Σχήμα 6.9: Πάνω: Επιφάνειες σταθερής συχνότητας του φωτονικού κρυστάλλου του Σχ. 6.4 σε συχνότητα $0.219\omega_p$, μέσα στην ανηγμένη ζώνη \mathbf{k} , για τις καταστάσεις με πόλωση τύπου TM (αριστερά) και τύπου TE (δεξιά). Κάτω: Διαγράμματα κυματανυσμάτων στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τις καταστάσεις με πόλωση τύπου TM (πάνω) και τύπου TE (κάτω), σε συχνότητα $0.219\omega_p$. Στα αριστερά διαγράμματα παρουσιάζονται οι καμπύλες σταθερής συχνότητας στον αέρα και στα δεξιά οι αντίστοιχες καμπύλες στον κρύσταλλο. Οι οριζόντιες διακεκομμένες γραμμές παρέχουν τη διατήρηση της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Τα συνεχή βέλη παριστούν το προσπίπτον (σκούρο γκρι), ανακλώμενο (ανοιχτό γκρι) και διαθλώμενο (μαύρο) κυματόνυσμα στα διάφορα μέσα. Με διακεκομμένα βέλη κάθετα στις καμπύλες σταθερής συχνότητας δείχνουμε τις αντίστοιχες ταχύτητες ομάδας. Τα λεπτά κόκκινα βέλη αντιστοιχούν σε κυματόνυσμα και ταχύτητες ομάδας διαθλώμενων κυμάτων για τα οποία η k_x συνιστώσα διατηρείται αλλά παραβιάζεται η αιτιότητα.

Δεδομένου ότι οι επιφάνειες σταθερής συχνότητας είναι κατά προσέγγιση συμμετρικές, μπορούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, να θέσουμε $k_y = 0$ και να εξετάσουμε τις αντίστοιχες καμπύλες σταθερής συχνότητας στο επίπεδο $k_x - k_z$. Όταν το φως προσπίπτει στην επιφάνεια $x - y$ του κρυστάλλου με $\mathbf{a}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$, η παράλληλη στην επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος (k_x) διατηρείται. Στο Σχ. 6.7 την απαίτηση αυτή δείχνουν σχηματικά οι οριζόντιες διακεκομμένες γραμμές. Οι τομές τους με την καμπύλη σταθερής συχνότητας του αέρα ορίζουν τα κυματανύσματα του προσπίπτοντος και ανακλώμενου κύματος, ενώ οι τομές τους με την επιφάνεια σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου παρέχουν, για κάθε κατάσταση πόλωσης, δύο πιθανές επιλογές για το κυματανύσμα του διαθλώμενου κύματος. Προκειμένου να καθορίσουμε ποιά από τις δύο είναι η σωστή λύση σε κάθε περίπτωση, υπολογίζουμε κατά τα γνωστά τη διεύθυνση της ταχύτητας ομάδος. Έτσι, στο Σχ. 6.9 επιλέγουμε ως διαθλώμενο το κύμα που έχει θετική συνιστώσα x της \mathbf{v}_g για τις καταστάσεις πόλωσης τύπου TM (θετική διάθλαση), και αυτό με αρνητική συνιστώσα x της \mathbf{v}_g για καταστάσεις πόλωσης τύπου TE (αρνητική διάθλαση).

Συμπεράσματα

Συνοψίζοντας, μελετήσαμε την οπτική απόκριση πλασματικών φωτονικών κρυστάλλων από μεταλλικούς νανοφλοιούς, μεταλλικούς νανοκυλίνδρους και μεταλλοδιηλεκτρικά νανοσάντουιτς μέσω ηλεκτροδυναμικών υπολογισμών ακριβείας με τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, και εξετάσαμε τη δυνατότητα εξομοίωσής τους με ομοιογενή μεταϋλικά που εμφανίζουν το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης. Αναλύοντας τη διαδεδομένη μέθοδο ομοιογενοποίησης μέσω του πίνακα σκέδασης **S** πεπερασμένων πλακιδίων ερμηνεύσαμε την προέλευση αφύσικων δομών συντονισμού που εμφανίζονται συχνά στις ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους που εξάγονται από αυτήν, ιδιαίτερα για πλακίδια μεγάλου πάχους, και προτείναμε σαφείς και αποτελεσματικούς τρόπους αντιμετώπισης αυτών των προβλημάτων με βάση τις ιδιότητες του άπειρου κρυστάλλου. Αναπτύξαμε μια νέα, αποτελεσματική μέθοδο ομοιογενοποίησης ισοτροπικών αλλά και ανισοτροπικών φωτονικών κρυστάλλων, βασισμένη σε ακριβείς υπολογισμούς των ιδιοτήτων του άπειρου κρυστάλλου. Οι ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι που υπολογίζονται είναι τέτοιες ώστε να αναπαράγουν ακριβώς όχι μόνο τους συντελεστές ανάκλασης του υλικού, αλλά και τις σχέσεις διασποράς του, για κάθε πόλωση και κάθε γωνία πρόσπτωσης. Η μέθοδος διαθέτει αυστηρά εσωτερικά κριτήρια ελέγχου της ακριβείας των αποτελεσμάτων, τα οποία μπορούν να εκφραστούν και ποσοτικά. Επεκτείναμε τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης ώστε να συμπεριλάβει τη δυνατότητα υπολογισμού του πίνακα σκέδασης **T** πολυστρωματικών σφαιρικών σωματιδίων, με μη τοπικές διορθώσεις, και του συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου. Η μέθοδος υπολογισμού του συντελεστή ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου επιτρέπει παράλληλα και την αναζήτηση επιφανειακών καταστάσεων. Επιπλέον, εισαγάγαμε μια μέθοδο ανάλυσης των επιφανειών σταθερής συχνότητας που παρέχει χρήσιμες πληροφορίες για την οπτική απόκριση μιας περιοδικής δομής, και ιδιαίτερα τη διαθλαστική της συμπεριφορά.

Οι περιοδικές δομές μεταλλικών νανοφλοιών χαρακτηρίζονται από πλούσια φάσματα εύκολα ρυθμίσιμων στη συχνότητα πλασματικών καταστάσεων, που αντιστοιχούν σε συντονισμούς ηλεκτρικού τύπου. Τέτοιες δομές μπορούν να εξομοιωθούν με ισοτροπικά ή ανισοτροπικά μεταϋλικά, των οποίων η διηλεκτρική συνάρτηση παρουσιάζει συντονισμό, και εμφανίζουν το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης ενώ ταυτόχρονα δρουν ως φίλτρα πόλωσης. Επιπλέον, υποστηρίζουν πλήθος επιφανειακών φωτονικών καταστάσεων με σημαντικό μήκος διάδοσης.

Οι περιοδικές δομές μεταλλικών νανοκυλίνδρων χαρακτηρίζονται από φάσματα στα οποία κυριαρχεί η διαμήκης διπολική πλασματική κατάσταση και περιγράφονται ικανοποιητικά ως μονοαξονικά ισοδύναμα ομοιογενή μέσα. Εμφανίζουν αρνητική διάθλαση σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων, αλλά και το φαινόμενο της αυτοσευθυγράμμισης. Ο συνδυασμός της αρνητικής διάθλασης με επίπεδες ζώνες καταστάσεων πλακιδίου επιτρέπει τον σχεδιασμό υπερφακών, ενώ γραμμικές περιοδικές αλυσίδες τέτοιων νανοκυλίνδρων μπορούν να αξιοποιηθούν ως κυ-

ματοδηγοί σε διαστάσεις μικρότερες από το μήκος κύματος.

Οι περιοδικές δομές μεταλλοδιηλεκτρικών νανοσάντουιτς διαθέτουν δύο υβριδικές πλασμονικές καταστάσεις που προέρχονται από την αλληλεπίδραση των πλασμονικών καταστάσεων των μεταλλικών νανοδίσκων. Σε πεπερασμένα πλακίδια από νανοσάντουιτς η αντισυμμετρική κατάσταση οδηγεί σε οπτικό μαγνητισμό, που εκδηλώνεται ως συντονισμός της μαγνητικής διαπερατότητας, η οποία γίνεται αρνητική σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων. Τέτοια πλακίδια είναι πολύ πιο ισοτροπικά από άλλες δομές που εμφανίζουν τεχνητό μαγνητισμό, και δεν επηρεάζονται από την πόλωση, ενώ οι ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι συγκλίνουν πολύ γρήγορα με το πάχος του πλακιδίου. Επιπλέον, ένας άπειρος κρύσταλλος τέτοιων νανωσωματιδίων μπορεί να παρουσιάζει και αρνητική διάθλαση, λόγω ανισοτροπίας κατά τη διεύθυνση οικοδόμησής του.

Παράρτημα Α'

Διανυσματικές ταυτότητες

Τα εσωτερικά και εξωτερικά γινόμενα για τους πιθανούς συνδυασμούς τεσσάρων διανυσμάτων, \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} και \mathbf{d} δίνονται από τις σχέσεις

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

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{c} \quad (\text{A'.2})$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) . \quad (\text{A'.3})$$

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

$$\nabla \times \nabla \psi = 0 \quad (\text{A'.4})$$

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

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{a}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla^2 \mathbf{a} \quad (\text{A'.6})$$

$$\nabla \cdot (\psi \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \mathbf{a} \quad (\text{A'.7})$$

$$\nabla \times (\psi \mathbf{a}) = \nabla \psi \times \mathbf{a} + \psi \nabla \times \mathbf{a} \quad (\text{A'.8})$$

$$\nabla (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{a} + \mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}) + \mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{a}) \quad (\text{A'.9})$$

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

$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{a} (\nabla \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b} (\nabla \cdot \mathbf{a}) + (\mathbf{b} \cdot \nabla) \mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} . \quad (\text{A'.11})$$

Παράρτημα Β'

Συναρτήσεις Bessel

Η εξίσωση Laplace για βαθμωτά πεδία, $\nabla^2 F(\mathbf{r}) = 0$, επιδέχεται σε κυλινδρικές συντεταγμένες 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 μέσω της εξίσωσης Bessel,

$$F_\nu''(x) + \frac{1}{x}F_\nu'(x) + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right)F_\nu(x) = 0, \quad (\text{B'.1})$$

όπου ο τόνος συμβολίζει παραγώγηση ως προς το όρισμα της συνάρτησης. Η Εξ. (B'.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 $\pm\nu$

$$J_{\pm\nu}(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{\pm\nu} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!\Gamma(s \pm \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s}. \quad (\text{B'.2})$$

Για ακέραιες τιμές του $\nu = n$ ισχύει

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), \quad (\text{B'.3})$$

και μια δεύτερη γραμμικά ανεξάρτητη λύση είναι η συνάρτηση Bessel δεύτερου είδους,

$$N_\nu(x) = \frac{J_\nu(x) \cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}, \quad (\text{B'.4})$$

η οποία υπολογίζεται οριακά για $\nu \rightarrow n$. Από όλες τις δυνατές λύσεις της Εξ. (B'.1) μόνο η συνάρτηση Bessel πρώτου είδους δεν απειρίζεται στο $x = 0$. Οι συναρτήσεις μορφής Bessel πληρούν τις αναγωγικές σχέσεις

$$F_{\nu-1}(x) + F_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x}F_\nu(x) \quad (\text{B'.5})$$

$$F_{\nu-1}(x) - F_{\nu+1}(x) = 2F_\nu'(x). \quad (\text{B'.6})$$

Οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους μπορούν να υπολογιστούν και από τις ολοκληρωτικές εκφράσεις

$$J_\nu(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \cos(x \sin \phi - \nu\phi) \quad (\text{B'.7})$$

$$= \frac{1}{\pi i^\nu} \int_0^\pi d\phi \exp(ix \cos \phi) \cos(\nu\phi) \quad (\text{B'.8})$$

$$= \frac{1}{2\pi i^\nu} \int_0^{2\pi} d\phi \exp(i[z \cos \phi + \nu\phi]) , \quad (\text{B'.9})$$

ενώ ικανοποιούν τις αθροιστικές ταυτότητες

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(x) = 1 \quad (\text{B'.10})$$

και

$$\exp(ix \cos \phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(x) \exp(in\phi) . \quad (\text{B'.11})$$

Η εξίσωση Helmholtz για βαθμωτά πεδία, $\nabla^2 F(\mathbf{r}) + q^2 F(\mathbf{r}) = 0$, επιδέχεται λύσεις της μορφής $F(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} f_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$, όπου $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές (βλ. Παράρτημα Γ'), με το $\hat{\mathbf{r}}$ να δηλώνει την εξάρτηση του διανύσματος \mathbf{r} από τις γωνίες θ, ϕ στις σφαιρικές συντεταγμένες, και $f_\ell(qr)$ είναι το ακτινικό τμήμα των λύσεων της εξίσωσης Helmholtz

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + q^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] f_\ell(qr) = 0 , \quad (\text{B'.12})$$

ή, ισοδύναμα,

$$f_\ell''(x) + \frac{2}{x} f_\ell'(x) + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] f_\ell(x) = 0 \quad (\text{B'.13})$$

με $x = qr$, αν εκφράσουμε τον τελεστή ∇^2 σε σφαιρικές συντεταγμένες. Η Εξ. (B'.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

$$j_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+1/2}(x) = (2x)^\ell \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+\ell)!}{s! (2s+2\ell+1)!} x^{2s} \quad (\text{B'.14})$$

$$n_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{\ell+1/2}(x) = 2(-2x)^{-\ell-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-\ell)!}{s! (2s-2\ell)!} x^{2s} \quad (\text{B'.15})$$

$$h_\ell^+(x) = j_\ell(x) + i n_\ell(x) \quad (\text{B'.16})$$

$$h_\ell^-(x) = j_\ell(x) - i n_\ell(x) , \quad (\text{B'.17})$$

και οι οποίες συχνά αποκαλούνται συλλογικά σφαιρικές συναρτήσεις Bessel. Από όλες τις λύσεις, μόνο η $j_\ell(x)$ δεν απειρίζεται στο $x = 0$. Για όλες τις σφαιρικές συναρτήσεις Bessel ισχύουν οι αναγωγικές σχέσεις

$$x f_\ell'(x) = \ell f_\ell(x) - x f_{\ell+1}(x) \quad (\text{B'.18})$$

$$(2\ell+1) f_\ell(x) = x f_{\ell-1}(x) + x f_{\ell+1}(x) \quad (\text{B'.19})$$

$$x f_{\ell-1}(x) = x f_\ell'(x) + (\ell+1) f_\ell(x) \quad (\text{B'.20})$$

$$(2\ell + 1) f'_\ell(x) = \ell f_{\ell-1}(x) - (\ell + 1) f_{\ell+1}(x) . \quad (\text{B}'21)$$

Συχνά είναι χρήσιμη είναι και η ορίζουσα Wronski,

$$\begin{vmatrix} j_\ell(x) & n_\ell(x) \\ j'_\ell(x) & n'_\ell(x) \end{vmatrix} = \frac{1}{x^2} . \quad (\text{B}'22)$$

Η ασυμπτωτική συμπεριφορά των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel ($x \gg 1$) είναι

$$j_\ell(x \gg 1) \sim \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (\text{B}'23)$$

$$n_\ell(x \gg 1) \sim -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (\text{B}'24)$$

$$h_\ell^+(x \gg 1) \sim (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \quad (\text{B}'25)$$

$$h_\ell^-(x \gg 1) \sim i^{\ell+1} \frac{e^{-ix}}{x} , \quad (\text{B}'26)$$

ενώ για μικρά ορίσματα ($x \ll 1$) ισχύουν οι

$$j_\ell(x \ll 1) \sim \frac{x^\ell}{(2\ell + 1)!!} \quad (\text{B}'27)$$

$$n_\ell(x \ll 1) \sim -\frac{(2\ell - 1)!!}{x^{\ell+1}} . \quad (\text{B}'28)$$

Παράρτημα Γ'

Σφαιρικές αρμονικές

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

$$\begin{aligned} \nabla^2 Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \right] Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \\ &= -\frac{\mathbf{L}^2}{r^2} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (\Gamma'.1)$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= -i(\mathbf{r} \times \nabla) = i \left(\hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} - \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ \mathbf{L}^2 &= -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}, \end{aligned} \quad (\Gamma'.2)$$

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

$$Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (\Gamma'.3)$$

με $\ell = 0, 1, \dots$, $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$ και $P_{\ell}^m(\cos \theta)$ τα προσαρτημένα πολυώνυμα Legendre

$$P_{\ell}^m(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^{\ell}, \quad x = \cos \theta \quad (\Gamma'.4)$$

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

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(x). \quad (\Gamma'.5)$$

Από τις παραπάνω προκύπτει

$$Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\Gamma'.6)$$

και

$$Y_{\ell m}(-\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.7)$$

$$Y_{\ell m}(\theta = 0, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} \delta_{m0}. \quad (\Gamma'.8)$$

Οι $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ πληρούν τις σχέσεις ορθογωνιότητας και πληρότητας

$$\int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\Gamma'.9)$$

$$\sum_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') = \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'), \quad (\Gamma'.10)$$

με το $d\Omega$ να συμβολίζει ολοκλήρωση στη στερεά γωνία, το θεώρημα άθροισης σφαιρικών αρμονικών

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi}, \quad (\Gamma'.11)$$

μια σειρά σχέσεων που συνδέουν αρμονικές διάφορων τάξεων

$$\cos \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \zeta_{\ell+1}^m Y_{\ell+1 m}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_{\ell}^m Y_{\ell-1 m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.12)$$

$$e^{i\phi} \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 2 [\gamma_{\ell}^{-m} Y_{\ell-1 m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell+1}^{m+1} Y_{\ell+1 m+1}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (\Gamma'.13)$$

$$e^{-i\phi} \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 2 [\gamma_{\ell+1}^{-m+1} Y_{\ell+1 m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell}^m Y_{\ell-1 m-1}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (\Gamma'.14)$$

$$m \cot \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = - [\alpha_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) + \alpha_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}})], \quad (\Gamma'.15)$$

καθώς και τις

$$\frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} = \alpha_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \alpha_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.16)$$

$$= i\psi_{\ell} X_{\ell m, \phi}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.17)$$

$$\frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} = im Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.18)$$

$$= -i\psi_{\ell} \sin \theta X_{\ell m, \theta}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\Gamma'.19)$$

Τέλος, ισχύει

$$\begin{aligned} \nabla [f_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] &= f_{\ell}(qr) \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + q f'_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \\ &= i\psi_{\ell} \frac{f_{\ell}(qr)}{r} [X_{\ell m, \phi}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\theta}} - X_{\ell m, \theta}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\phi}}] \\ &\quad + q f'_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (\Gamma'.20)$$

Στις παραπάνω σχέσεις

$$\psi_{\ell} = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \quad (\Gamma'.21)$$

$$\alpha_{\ell}^m = \frac{1}{2} [(\ell - m)(\ell + m + 1)]^{1/2} \quad (\Gamma'.22)$$

$$\gamma_\ell^m = \frac{[(\ell + m)(\ell + m - 1)]^{1/2}}{2[(2\ell - 1)(2\ell + 1)]^{1/2}} \quad (\Gamma'.23)$$

$$\zeta_\ell^m = \frac{[(\ell + m)(\ell - m)]^{1/2}}{[(2\ell - 1)(2\ell + 1)]^{1/2}}, \quad (\Gamma'.24)$$

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

$$\psi_\ell \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \mathbf{L}Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \equiv -i\mathbf{r} \times \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\Gamma'.25)$$

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

$$\begin{aligned} \psi_\ell \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \left[\alpha_\ell^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + \alpha_\ell^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &\quad + i \left[\alpha_\ell^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \alpha_\ell^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\boldsymbol{\phi}} \end{aligned} \quad (\Gamma'.26)$$

$$= \alpha_\ell^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{z}} + \alpha_\ell^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}). \quad (\Gamma'.27)$$

Από τις $\mathbf{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}$ και $\mathbf{L}^2 \mathbf{L} = \mathbf{L} \mathbf{L}^2$ θα ισχύει $\mathbf{L}^2 \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \ell(\ell + 1) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$. Από τις Εξ. (Γ'.25) προκύπτει ότι

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\Gamma'.28)$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} = X_{\ell m, \phi}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\theta}} - X_{\ell m, \theta}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\phi}} = -\frac{i r \nabla Y_{\ell m}}{\psi_\ell}, \quad (\Gamma'.29)$$

και

$$\hat{\mathbf{r}} \times [\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}] = \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\Gamma'.30)$$

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

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{r} \left[i\psi_\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - X_{\ell m, \phi}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\theta}} + X_{\ell m, \theta}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\boldsymbol{\phi}} \right] \\ &= \frac{1}{r} [i\psi_\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}] \\ &= \frac{i}{\psi_\ell} \left[\frac{\psi_\ell^2}{r} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} + \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \end{aligned} \quad (\Gamma'.31)$$

και

$$\nabla \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 0, \quad (\Gamma'.32)$$

ενώ με τη βοήθειά τους προκύπτουν οι

$$\nabla \times f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = q \left\{ i\psi_\ell \frac{f_\ell(x)}{x} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - \left[f_\ell'(x) + \frac{f_\ell(x)}{x} \right] \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} \right\} \quad (\Gamma'.33)$$

$$\nabla \cdot [f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = 0 \quad (\Gamma'.34)$$

$$\nabla^2 [f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = -\nabla \times [\nabla \times f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = -q^2 f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\Gamma'.35)$$

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

$$\begin{aligned} \nabla \{ \nabla \cdot [f_\ell(x) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \} &= \nabla [\nabla f_\ell(x) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + f_\ell(x) \nabla \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = \\ &= \nabla [\nabla f_\ell(x) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = 0. \end{aligned} \quad (\Gamma'.36)$$

Οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές πληρούν τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\Gamma'.37)$$

$$\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})] = 0, \quad (\Gamma'.38)$$

από όπου προκύπτει

$$\begin{aligned} \sum_{\ell m} \left\{ \mathcal{A}_{\ell m}^{(1)}(r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + \mathcal{A}_{\ell m}^{(2)}(r) [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \right\} &= 0 \Rightarrow \\ \mathcal{A}_{\ell m}^{(1)}(r) &= \mathcal{A}_{\ell m}^{(2)}(r) = 0. \end{aligned} \quad (\Gamma'.39)$$

Τέλος, μπορεί ναδειχθεί ότι

$$\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \nabla [f_\ell(r) \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})] = 0, \quad (\Gamma'.40)$$

και με τη βοήθεια των Εξ. (Γ'.9) και (Γ'.27) ότι

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) &= \frac{\delta_{\ell\ell'}}{\psi_\ell} \left[\delta_{m+1m'} \alpha_{\ell'}^{-m'} (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) + \right. \\ &\quad \left. + \delta_{mm'} m \hat{\mathbf{z}} + \delta_{m-1m'} \alpha_{\ell'}^{m'} (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) \right] \end{aligned} \quad (\Gamma'.41)$$

και

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} &= \delta_{m+1m'} (-\gamma_{\ell+1}^{m+1} \delta_{\ell+1\ell'} + \gamma_\ell^{-m} \delta_{\ell-1\ell'}) (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) + \\ &\quad + \delta_{m-1m'} (\gamma_{\ell+1}^{-m+1} \delta_{\ell+1\ell'} - \gamma_\ell^m \delta_{\ell-1\ell'}) (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + \\ &\quad + \delta_{mm'} (\zeta_{\ell+1}^m \delta_{\ell+1\ell'} + \zeta_\ell^m \delta_{\ell-1\ell'}) \hat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad (\Gamma'.42)$$

Παράρτημα Δ'

Το υδροδυναμικό μοντέλο

Ένα απλό μοντέλο που περιγράφει ικανοποιητικά τη συμπεριφορά των μετάλλων σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων είναι το μοντέλο πλάσματος [31,126]. Η βασική υπόθεση του μοντέλου είναι ότι το μέταλλο αποτελείται από ένα ομοιογενές αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων, πυκνότητας n , το οποίο κινείται σε ένα ομοιογενές υπόβαθρο θετικού φορτίου που δημιουργούν τα ιόντα. Το δυναμικό του πλέγματος και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων αλληλοεξουδετερώνονται. Αντίθετα, μπορεί να θεωρηθεί ότι τα κύρια χαρακτηριστικά ζωνών συνυπολογίζονται χρησιμοποιώντας την ενεργό μάζα, m , των ηλεκτρονίων. Με εφαρμογή εξωτερικού πεδίου τα ηλεκτρόνια αρχίζουν να ταλαντώνονται. Παράλληλα, υπάρχει απόσβεση, η οποία οφείλεται σε συγκρούσεις με τα ιόντα, συχνότητας $1/\tau$. Το μέγεθος τ ονομάζεται χρόνος αποκατάστασης του αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων. Το εύρος της ισχύος του μοντέλου για τα αλκαλικά μέταλλα εκτείνεται μέχρι το υπεριώδες. Αντίθετα, στα ευγενή μέταλλα, λόγω των μεταβάσεων των ηλεκτρονίων μεταξύ ζωνών που λαμβάνουν χώρα στην ορατή περιοχή του φάσματος, η ισχύς του μοντέλου περιορίζεται.

Για απλότητα, θα εξετάσουμε μόνο τις υψίσυχνες ταλαντώσεις πλάσματος, αγνοώντας την κίνηση των ιόντων. Η κίνηση των ηλεκτρονίων μπορεί να περιγραφεί μέσω της πυκνότητας, $n(\mathbf{r}, t)$, και της μέσης ταχύτητας, \mathbf{v} . Η κίνηση του ηλεκτρονικού αερίου περιγράφεται από τις εξισώσεις κίνησης της υδροδυναμικής [83]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} &= -\frac{e}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{v}}{\tau} - \frac{1}{mn} \nabla p, \end{aligned} \quad (\Delta'.1)$$

όπου p είναι η πίεση του ηλεκτρονικού αερίου, ενώ ο όρος \mathbf{v}/τ αναφέρεται στις συγκρούσεις των ηλεκτρονίων με τα ιόντα. Απουσία εξωτερικής διέγερσης το ηλεκτρονικό αέριο βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας και η πυκνότητά του, $n = n^{(0)}$, είναι σταθερή στον χώρο. Θα εξετάσουμε τώρα μικρές αποκλίσεις από την κατάσταση ισορροπίας, $n = n^{(0)} + n^{(1)}$, που οφείλονται σε εξωτερική διέγερση. Οι γραμμικοποιημένες εξισώσεις κίνησης παίρνουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^{(1)}}{\partial t} + n^{(0)} \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{e}{m} \mathbf{E} + \frac{1}{mn^{(0)}} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial n^{(1)}} \nabla n^{(1)} &= -\frac{\mathbf{v}}{\tau}. \end{aligned} \quad (\Delta'.2)$$

Η πρώτη είναι η εξίσωση συνέχειας, ενώ η δεύτερη γράφεται

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{e}{m} \mathbf{E} + \frac{\beta^2}{n^{(0)}} \nabla n^{(1)} = -\frac{\mathbf{v}}{\tau}, \quad (\Delta'.3)$$

όπου $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ είναι το πεδίο ταχυτήτων που διαμορφώνεται όταν αποκλίνουμε από την ισορροπία (σημειώνουμε ότι στην κατάσταση ισορροπίας δεν έχουμε ηλεκτρικό ρεύμα, δηλαδή η ταχύτητα του ρευστού είναι παντού μηδενική), και

$$\beta^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial n^{(1)}}. \quad (\Delta'.4)$$

Έτσι, η εξίσωση που περιγράφει την κίνηση των ηλεκτρονίων και η εξίσωση συνέχειας γράφονται συναρτήσει της μετατόπισης, \mathbf{x} , από τη θέση ισορροπίας ως

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial t^2} &= -\frac{e}{m} \mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} - \frac{\beta^2}{n^{(0)}} \nabla n^{(1)} \\ \frac{\partial n^{(1)}}{\partial t} + n^{(0)} \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (\Delta'.5)$$

Υποθέτοντας ότι τα πεδία και οι μετατοπίσεις έχουν τη μορφή επίπεδων κυμάτων, $\sim \exp(i[\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t])$, λαμβάνουμε για τα πλάτη

$$\begin{aligned} -\omega^2 \mathbf{x}_0 &= -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 - \frac{i}{\tau} \omega \mathbf{x}_0 - i \frac{\beta^2}{n^{(0)}} \mathbf{q} n_0^{(1)} \\ -i \omega n_0^{(1)} + n^{(0)} \omega \mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_0 &= 0, \end{aligned} \quad (\Delta'.6)$$

και, συνδυάζοντας τις δύο τελευταίες σχέσεις,

$$\omega^2 \mathbf{x}_0 = \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 - \frac{i}{\tau} \omega \mathbf{x}_0 + \beta^2 \mathbf{q} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_0). \quad (\Delta'.7)$$

Αναλύοντας τα διανύσματα \mathbf{x}_0 και \mathbf{E}_0 σε μία παράλληλη και μία κάθετη στη διεύθυνση του κυματανύσματος συνιστώσα, έχουμε

$$\begin{aligned} x_{\perp} &= \frac{e}{m} \frac{1}{\omega (\omega + i\tau^{-1})} E_{\perp} \\ x_{\parallel} &= \frac{e}{m} \frac{1}{\omega^2 - \beta^2 q^2 + i\omega\tau^{-1}} E_{\parallel}. \end{aligned} \quad (\Delta'.8)$$

Η μετατόπιση των ηλεκτρονίων επάγει μακροσκοπική πόλωση του υλικού, $\mathbf{P} = -ne\mathbf{x}$, οπότε

$$\begin{aligned} P_{\perp} &= -\frac{ne^2}{m\omega (\omega + i\tau^{-1})} E_{\perp} \\ P_{\parallel} &= -\frac{ne^2}{m(\omega^2 - \beta^2 q^2 + i\omega\tau^{-1})} E_{\parallel}. \end{aligned} \quad (\Delta'.9)$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις αυτές με την $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \equiv \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}$ καταλήγουμε στη (σχετική) διηλεκτρική συνάρτηση

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\perp} &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\tau^{-1})} \\ \varepsilon_{\parallel} \equiv \varepsilon_L &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \beta^2 q^2 + i\omega\tau^{-1}}, \end{aligned} \quad (\Delta'.10)$$

όπου $\omega_p = ne^2/(\varepsilon_0 m)$ είναι η συχνότητα πλάσματος του αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων. Η πρώτη είναι η γνωστή εξίσωση Drude.

Για τον προσδιορισμό της παραμέτρου β θεωρούμε αδιαβατική διαδικασία,

$$\frac{p^{(0)} + p^{(1)}}{[n^{(0)} + n^{(1)}]^\gamma} = \frac{p^{(0)}}{[n^{(0)}]^\gamma} \Rightarrow p^{(0)} + p^{(1)} \simeq p^{(0)} \left[1 + \frac{n^{(1)}}{n^{(0)}} \right]^\gamma \Rightarrow p^{(1)} = n^{(1)} \gamma \frac{p^{(0)}}{n^{(0)}},$$

οπότε

$$\frac{\partial p^{(1)}}{\partial n^{(1)}} = \gamma \frac{p^{(0)}}{n^{(0)}}. \quad (\Delta'.11)$$

Σε ένα εκφυλισμένο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων $p^{(0)} = 2n^{(0)} E_F/5$, όπου $E_F = mV_F^2/2$ η ενέργεια Fermi, οπότε $\beta^2 = \gamma V_F^2/5$, με V_F την ταχύτητα Fermi. Η τιμή του γ εξαρτάται από τον αριθμό των βαθμών ελευθερίας, f , σύμφωνα με τη σχέση $\gamma = (f + 2)/f$. Στην περίπτωση μας αναφερόμαστε σε ένα τρισδιάστατο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων. Ωστόσο, η τιμή $f = 3$ αντιστοιχεί σε πολύ χαμηλές συχνότητες, όπου η τυχαιότητα των συγκρούσεων επιτρέπει πραγματικά κίνηση και στις τρεις διαστάσεις. Σε υψηλές συχνότητες ταλάντωσης η κίνηση εκτελείται ουσιαστικά στη διεύθυνση του εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, και επομένως $f = 1$ [343]. Έτσι παίρνουμε $\beta^2 = 3V_F^2/5$ για $\omega \gg \tau^{-1}$, που είναι η περίπτωση που μας απασχολεί εδώ, ενώ $\beta^2 = V_F^2/3$ για $\omega \ll \tau^{-1}$. Τότε η διαμήκης διηλεκτρική συνάρτηση ($\Delta'.10$) γίνεται

$$\varepsilon_L(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - (3/5)V_F^2 q^2 + i\omega\tau^{-1}}. \quad (\Delta'.12)$$

Παράρτημα Ε'

Πίνακας σκέδασης μεταλλικού νανοφλοιού με μη τοπικούς όρους

Θεωρούμε έναν μεταλλικό νανοφλοιό αποτελούμενο από έναν διηλεκτρικό πυρήνα ακτίνας S_1 , που περιγράφεται από διηλεκτρική συνάρτηση ε_1 και μαγνητική διαπερατότητα μ_1 , και ένα μεταλλικό περίβλημα πάχους C , που περιγράφεται από αντίστοιχες συναρτήσεις απόκρισης, ε_2 και μ_2 , σε περιβάλλον με επιδεκτικότητα ε και διαπερατότητα μ . Η συνολική ακτίνα του σωματιδίου είναι προφανώς $S = S_1 + C$. Αν το μεταλλικό περίβλημα είναι αρκετά λεπτό, θα εκδηλώνονται μη τοπικά φαινόμενα, μέσω της διέγερσης διαμήκων κυμάτων και μιας διαμήκουσ διηλεκτρικής συνάρτησης ε_L . Εφαρμόζοντας στις δύο διαχωριστικές επιφάνειες, μεταξύ του διηλεκτρικού πυρήνα και του μεταλλικού φλοιού, και μεταξύ του φλοιού και του περιβάλλοντος, τις συνοριακές συνθήκες (2.8) και (2.16) παίρνουμε για το μαγνητικό κομμάτι του πίνακα σκέδασης

$$T_{H\ell} = \frac{j_\ell(qr)J_\ell(q_2r)\mu - j_\ell(q_2r)J_\ell(qr)\mu_2 + T_{H\ell}^{(1)} [j_\ell(qr)H_\ell(q_2r)\mu - h_\ell^+(q_2r)J_\ell(qr)\mu_2]}{j_\ell(q_2r)H_\ell(qr)\mu_2 - h_\ell^+(qr)J_\ell(q_2r)\mu + T_{H\ell}^{(1)} [h_\ell^+(q_2r)H_\ell(qr)\mu_2 - h_\ell^+(qr)H_\ell(q_2r)\mu]} \Big|_{r=S},$$

όπου έχουμε ορίσει $J(qr) \equiv (\partial/\partial r)[rj_\ell(qr)]$, $H(qr) \equiv (\partial/\partial r)[rh_\ell^+(qr)]$, ενώ $T_{H\ell}^{(1)}$ είναι ο πίνακας σκέδασης του εσωτερικού στρώματος (μιας σφαίρας ακτίνας S_1 και συναρτήσεων απόκρισης ε_1 και μ_1 σε περιβάλλον συναρτήσεων απόκρισης ε_2 και μ_2). Αντίστοιχα, το ηλεκτρικό κομμάτι του πίνακα σκέδασης δίνεται από τη σχέση $a_{\ell m}^+ = T_{E\ell} a_{\ell m}^0$, όπου

$$\begin{aligned} & a_{\ell m}^+ \left\{ id_\ell(q_2S_1)(q_L S_1)^2(q_2S)j_\ell(q_1S_1)h_\ell^+(qS) [h_\ell^+(q_2S)F_1 - j_\ell(q_2S)F_2] \varepsilon_1 - \right. \\ & - (q_L S_1)^4(q_2S)^2 h_\ell^+(qS)G_2 [h_\ell^+(q_2S)F_1 - j_\ell(q_2S)F_2] \varepsilon - \\ & - d_\ell(q_2S_1)^2(q_L S) [j_\ell(q_1S_1)]^2 h_\ell^+(qS)C_2 \varepsilon_1^2 - \\ & - i(q_2S_1)(q_L S_1)^2(q_2S)(q_L S)j_\ell(q_1S_1)h_\ell^+(qS)G_2C_2 \varepsilon \varepsilon_1 - \\ & - i(q_2S_1)(q_L S_1)^2(q_2S)(q_L S)j_\ell(q_1S_1)T_{2D} [h_\ell^+(q_2S)G_1 - j_\ell(q_2S)G_2] \varepsilon_1 + \\ & \left. + (q_L S_1)^4(q_2S)^2 h_\ell^+(qS)F_2 [h_\ell^+(q_2S)G_1 - j_\ell(q_2S)G_2] \varepsilon \right\} = \\ & = a_{\ell m}^0 \left\{ -id_\ell(q_2S_1)(q_L S_1)^2(q_2S)j_\ell(q_1S_1)j_\ell(qS) [h_\ell^+(q_2S)F_1 - j_\ell(q_2S)F_2] \varepsilon_1 + \right. \\ & \left. + (q_L S_1)^4(q_2S)^2 j_\ell(qS)G_2 [h_\ell^+(q_2S)F_1 - j_\ell(q_2S)F_2] \varepsilon + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + d_\ell (q_2 S_1)^2 (q_L S) [j_\ell(q_1 S_1)]^2 j_\ell(q S) C_2 \varepsilon_1^2 \\
& + i (q_2 S_1) (q_L S_1)^2 (q_2 S) (q_L S) j_\ell(q_1 S_1) j_\ell(q S) G_2 C_2 \varepsilon \varepsilon_1 + \\
& + i (q_2 S_1) (q_L S_1)^2 (q_2 S) (q_L S) j_\ell(q_1 S_1) T_{2N} [h_\ell^+(q_2 S) G_1 - j_\ell(q_2 S) G_2] \varepsilon_1 - \\
& - (q_L S_1)^4 (q_2 S)^2 j_\ell(q S) F_2 [h_\ell^+(q_2 S) G_1 - j_\ell(q_2 S) G_2] \varepsilon \} ,
\end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned}
c_\ell & = \ell (\ell + 1) j_\ell(q_1 S_1) (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \\
d_\ell & = \ell (\ell + 1) h_\ell^+(q_2 S) (\varepsilon_2 - \varepsilon) \\
C_2 & = h_\ell^+(q_2 S) J_\ell(q_2 S) - j_\ell(q_2 S) H_\ell(q_2 S) \\
T_{1N} & = j_\ell(q_1 S_1) J_\ell(q_2 S_1) \varepsilon_1 - j_\ell(q_2 S_1) J_\ell(q_1 S_1) \varepsilon_2 \\
T_{1D} & = j_\ell(q_1 S_1) H_\ell(q_2 S_1) \varepsilon_1 - h_\ell^+(q_2 S_1) J_\ell(q_1 S_1) \varepsilon_2 \\
T_{2N} & = h_\ell^+(q_2 S) J_\ell(q S) \varepsilon_2 - j_\ell(q S) H_\ell(q_2 S) \varepsilon \\
T_{2D} & = h_\ell^+(q_2 S) H_\ell(q S) \varepsilon_2 - h_\ell^+(q S) H_\ell(q_2 S) \varepsilon \\
F_1 & = (q_L S_1) T_{1N} [h_\ell^+(q_L S) j'_\ell(q_L S_1) - j_\ell(q_L S) h_\ell^{+'}(q_L S_1)] + \\
& \quad + c_\ell j_\ell(q_2 S_1) [j_\ell(q_L S_1) h_\ell^+(q_L S) - h_\ell^+(q_L S_1) j_\ell(q_L S)] \\
F_2 & = (q_L S_1) T_{1D} [h_\ell^+(q_L S) j'_\ell(q_L S_1) - j_\ell(q_L S) h_\ell^{+'}(q_L S_1)] + \\
& \quad + c_\ell h_\ell^+(q_2 S_1) [j_\ell(q_L S_1) h_\ell^+(q_L S) - h_\ell^+(q_L S_1) j_\ell(q_L S)] \\
G_1 & = (q_L S_1) T_{1N} [h_\ell^{+'}(q_L S) j'_\ell(q_L S_1) - j'_\ell(q_L S) h_\ell^{+'}(q_L S_1)] + \\
& \quad + c_\ell j_\ell(q_2 S_1) [j_\ell(q_L S_1) h_\ell^{+'}(q_L S) - h_\ell^+(q_L S_1) j'_\ell(q_L S)] \\
G_2 & = (q_L S_1) T_{1D} [h_\ell^{+'}(q_L S) j'_\ell(q_L S_1) - j'_\ell(q_L S) h_\ell^{+'}(q_L S_1)] + \\
& \quad + c_\ell h_\ell^+(q_2 S_1) [j_\ell(q_L S_1) h_\ell^{+'}(q_L S) - h_\ell^+(q_L S_1) j'_\ell(q_L S)] ,
\end{aligned}$$

με τον τόνο να υποδηλώνει παραγωγή ως προς το όρισμα της συνάρτησης, ενώ έχουμε χρησιμοποιήσει και την Εξ. (B'.22).

Παράρτημα Ϝ'

Η συνάρτηση Green

Στην περίπτωση που το υπό μελέτη σύστημα δεν παρουσιάζει διασπορά [$\varepsilon(\mathbf{r};\omega) = \varepsilon(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r};\omega) = \mu(\mathbf{r})$], ούτε απώλειες [$\varepsilon(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r}) \in \Re$], η κυματική εξίσωση (1.14), για το χωρικό μέρος του ηλεκτρικού πεδίου, μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$c^2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}} \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}} \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}) . \quad (\varphi'.1)$$

Ορίζοντας

$$\mathbf{\Lambda}(\mathbf{r}) = c^2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}} \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}} \quad (\varphi'.2)$$

η Εξ. (Ϝ'.1) γράφεται

$$\mathbf{\Lambda}(\mathbf{r}) \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}) . \quad (\varphi'.3)$$

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

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_V d^3r \mathbf{v}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{w}(\mathbf{r}) . \quad (\varphi'.4)$$

Ο $\hat{\Lambda}$ είναι ερμιτιανός, δηλαδή

$$(\mathbf{v}, \mathbf{\Lambda} \mathbf{w}) = (\mathbf{\Lambda} \mathbf{v}, \mathbf{w}) . \quad (\varphi'.5)$$

Για την απόδειξη της Εξ. (Ϝ'.5) 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 $\mathbf{\Lambda}(\mathbf{r})$ είναι ερμιτιανός, οι ιδιοτιμές του θα είναι πραγματικές, ενώ οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις θα αποτελούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση. Αυτές οι δύο ιδιότητες εκφράζονται μέσω των εξισώσεων

$$\sum_{\alpha} |\mathcal{C}_0|^2 \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} E_{\alpha;i}^*(\mathbf{r}) \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r}') } E_{\alpha;i'}(\mathbf{r}') = \delta_{ii'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (\varphi'.6)$$

$$\sum_i \int_V d^3r |\mathcal{C}_0|^2 \varepsilon(\mathbf{r}) E_{\alpha;i}^*(\mathbf{r}) E_{\alpha';i}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'} , \quad (\varphi'.7)$$

όπου ο δείκτης α χαρακτηρίζει τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του $\widehat{\Lambda}$ και C_0 είναι ο συντελεστής κανονικοποίησης.

Αξιοποιώντας τον συμβολισμό Dirac η εξίσωση ιδιοτιμών Εξ. (ϕ'.3) γράφεται

$$\widehat{\Lambda} |\alpha\rangle = \omega_\alpha^2 |\alpha\rangle, \quad (\varphi'.8)$$

ενώ οι ιδιότητες πληρότητας και ορθοκανονικότητας παίρνουν τη μορφή

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \widehat{I} \quad (\varphi'.9)$$

και

$$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (\varphi'.10)$$

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

$$\langle i\mathbf{r}|\alpha\rangle = |C_0| \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} E_{\alpha;i}(\mathbf{r}) \quad (\varphi'.11)$$

και

$$\langle i\mathbf{r}|\widehat{\Lambda}|i'\mathbf{r}'\rangle = \Lambda_{ii'}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (\varphi'.12)$$

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

$$\sum_i \int_V d^3r |i\mathbf{r}\rangle\langle i\mathbf{r}| = \widehat{I}, \quad (\varphi'.13)$$

$$\langle i\mathbf{r}|i'\mathbf{r}'\rangle = \delta_{ii'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (\varphi'.14)$$

μπορεί ναδειχθεί απευθείας ότι οι Εξ. (ϕ'.8), (ϕ'.9) και (ϕ'.10) δίνουν τις Εξ. (ϕ'.3), (ϕ'.6) και (ϕ'.7), αντίστοιχα.

Η επίλυση της διαφορικής κυματικής εξίσωσης του ΗΜ πεδίου στην περίπτωση περίπλοκων συνοριακών συνθηκών ή εξωτερικής διέγερσης 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

$$(z - \widehat{\Lambda}) \widehat{G}(z) = \widehat{I}, \quad (\varphi'.15)$$

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

$$\sum_i [z\delta_{ii'} - \Lambda_{ii'}(\mathbf{r})] G_{ii'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta_{ii'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (\varphi'.16)$$

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

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

$$\hat{G}(z) = \sum_{\alpha} \frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|}{z^2 - \omega_\alpha^2}, \quad (\text{φ'.17})$$

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 $|\mathbf{r}\rangle$ η Εξ. (φ'.17) γράφεται

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_{\alpha} \frac{|\mathcal{C}_0|^2 \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}_\alpha(\mathbf{r}) \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r}')} \mathbf{E}_\alpha^*(\mathbf{r}')}{z^2 - \omega_\alpha^2}, \quad (\text{φ'.18})$$

όπου η παράθεση δύο διανυσμάτων υπονοεί τανυστικό γινόμενο, δηλ. $(\mathbf{ab})_{ij} = a_i b_j$. Από την Εξ. (φ'.18) 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 $\hat{\Lambda}$.

Η χρονοεξαρτώμενη συνάρτηση Green, η οποία χρησιμεύει ιδιαίτερα στην περίπτωση που θεωρούμε εξωτερικές διεγέρσεις, προκύπτει ως εξής: Από τις Εξ. (1.1), μέσω των (φ'.3) και (φ'.2), για την περίπτωση που οι συναρτήσεις απόκρισης παρουσιάζουν μόνο χωρική εξάρτηση, καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση που ικανοποιεί το ηλεκτρικό πεδίο

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r}t)} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right] + \mathbf{\Lambda}(\mathbf{r}) \left[\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right] = 0. \quad (\text{φ'.19})$$

Έτσι, η συνάρτηση Green που διασφαλίζει χρονική υστέρηση του αποτελέσματος ως προς το αίτιο (αιτιότητα) ορίζεται μέσω των εξισώσεων

$$- \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \mathbf{\Lambda}(\mathbf{r}) \right] \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (\text{φ'.20})$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = 0 \quad \text{για} \quad t < t'. \quad (\text{φ'.21})$$

Η μετασχηματισμένη κατά Fourier συνάρτηση Green ορίζεται μέσω της εξίσωσης

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \exp(-i\omega[t - t']). \quad (\text{φ'.22})$$

Σημειώνεται ότι προκειμένου να διασφαλιστεί η αρχή της αιτιότητας θα πρέπει η αποφυγή των πόλων της χρονοανεξάρτητης συνάρτησης Green [Εξ. φ'.17] να γίνει θεωρώντας ότι η συχνότητα περιέχει ένα απειροστό φανταστικό μέρος ($\omega \rightarrow \omega + i\epsilon$). Η διαδικασία αυτή δεν θα δηλώνεται ρητά αλλά θα υπονοείται στο εξής.

Θέλουμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green για ένα ομοιογενές και ισότροπο μέσο διηλεκτρικής συνάρτησης ε και μαγνητικής διαπερατότητας μ . Σε αυτή την περίπτωση η Εξ. (φ'.1) γράφεται

$$\frac{c^2}{\varepsilon\mu} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (\text{φ'.23})$$

Θα βασιστούμε στη φασματική αναπαράσταση, Εξ. (ϑ'.18), αφού πρώτα προσδιορίσουμε το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων $\sqrt{\varepsilon} \mathbf{E}_\alpha(\mathbf{r})$, καθώς και το περιεχόμενο του δείκτη α στην εξίσωση ιδιοτιμών (ϑ'.23). Αρχικά 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 $p = 0, 1, 2$ του ΗΜ κύματος και το κυματόνυσμά του, \mathbf{q} . Τονίζουμε πως τα επίπεδα κύματα δεν χαρακτηρίζονται από την τιμή της συχνότητας: για δεδομένη τιμή του $\mathbf{q} = q \hat{\mathbf{e}}_0(\mathbf{q})$, τα διαμήκη κύματα ($p = 0$) αντιστοιχούν σε ιδιοσυχνότητα μηδέν και τα εγκάρσια ($p = 1, 2$, για πόλωση ΤΜ και ΤΕ, αντίστοιχα) σε ιδιοσυχνότητα $cq/\sqrt{\varepsilon\mu}$. Συμπερασματικά, γράφουμε τις ιδιοσυναρτήσεις στην αδιαστατοποιημένη μορφή

$$C_0 \sqrt{\varepsilon V} \mathbf{E}_{\mathbf{q}p}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (\vartheta'.24)$$

όπου V ο όγκος του συστήματος και C_0 σταθερά κατάλληλων διαστάσεων ώστε το $[C_0 \sqrt{\varepsilon V}]^{-1}$ να εκφράζει το μέτρο του επιπέδου κύματος. Οι σχέσεις πληρότητας και ορθογωνιότητας πρέπει να τροποποιηθούν ώστε να συμπεριλάβουν τη συνέχεια των ιδιοτιμών καθώς και τον εκφυλισμό (κύματα που έχουν το ίδιο q , αλλά διαφορετικά $\hat{\mathbf{q}}$ και p). Η μετάβαση από την άθροιση σε διακριτή μεταβλητή, όπως υπονοείται στις εξισώσεις (ϑ'.6) και (ϑ'.7), μπορεί να μετατραπεί σε άθροιση στη συνεχή μεταβλητή \mathbf{q} και τη διακριτή μεταβλητή p . Η άθροιση στη συνεχή μεταβλητή \mathbf{q} θα γίνει με βάση την αντιστοιχία $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow [V/(2\pi)^3] \int d^3q$, όπου V ο χαρακτηριστικός όγκος του συστήματος που μελετάμε. Έτσι οι Εξ. (ϑ'.6) και (ϑ'.7) παίρνουν τη μορφή

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q |C_0|^2 \varepsilon \sum_p E_{\mathbf{q}p,i}^*(\mathbf{r}) E_{\mathbf{q}p,i'}(\mathbf{r}') = \delta_{ii'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\vartheta'.25)$$

και

$$\sum_i \int d^3r |C_0|^2 \varepsilon E_{\mathbf{q}p,i}^*(\mathbf{r}) E_{\mathbf{q}'p',i}(\mathbf{r}) = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta_{pp'} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (\vartheta'.26)$$

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. (ϑ'.18), μέσω της Εξ. (ϑ'.24), προκύπτει η παρακάτω έκφραση για τη συνάρτηση Green στην αναπαράσταση επίπεδων κυμάτων

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_{p=0}^2 \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{\omega^2 - \omega_{p\mathbf{q}}^2}. \quad (\vartheta'.27)$$

Όμως ισχύει $\sum_{p=0}^2 \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) = \overleftrightarrow{\mathbf{I}}$ και $\sum_{p=1}^2 \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q}) = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{q}}\hat{\mathbf{q}}$. Έτσι προκύπτει

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{1}{\omega^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{q}\mathbf{q} - \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \kappa^2}{q^2 - \kappa^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}']), \quad (\vartheta'.28)$$

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

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

z των περιοδικών δομών στα πλαίσια της μεθόδου LMS. Σε αυτή την περίπτωση γράφουμε $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\parallel} + q_z \hat{\mathbf{z}}$, οπότε η Εξ. (ϕ'.28) μετασχηματίζεται στην έκφραση

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}}{\omega^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{1}{\omega^2} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} \exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot [\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}]) \\ &\times \left\{ \left[\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{q}_{\parallel} - \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \kappa^2 + (\kappa^2 - q_{\parallel}^2) \hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \frac{\exp(iq_z[z - z'])}{q_{\parallel}^2 + q_z^2 - \kappa^2} \right. \\ &\left. + (\mathbf{q}_{\parallel} \hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{z}} \mathbf{q}_{\parallel}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \frac{q_z \exp(iq_z[z - z'])}{q_{\parallel}^2 + q_z^2 - \kappa^2} \right\}, \end{aligned} \quad (\phi'.29)$$

Υπολογίζοντας με τη βοήθεια του λήμματος Jordan [92] τα δύο ολοκληρώματα ως προς q_z (βλ. επίσης Παράρτημα Ζ'), βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \frac{\hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}}}{\omega^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{i}{2\omega^2} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot [\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}]) + i\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2} |z - z'|}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \\ &\times \left[\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{q}_{\parallel} + (\kappa^2 - q_{\parallel}^2) \hat{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}} + \text{sgn}(z - z') \sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2} (\mathbf{q}_{\parallel} \hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{z}} \mathbf{q}_{\parallel}) - \kappa^2 \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \right]. \end{aligned} \quad (\phi'.30)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι, για $z = z'$, στην Εξ. (ϕ'.30) 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. (ϕ'.30) ισχύει και σε αυτή την περίπτωση [$\text{sgn}(z - z') = 0$]. Η συνάρτηση Green για την περίπτωση $z \neq z'$, που ενδιαφέρει συνήθως, γράφεται στην πιο συνεπτυγμένη μορφή

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{i}{2\omega^2} \int \frac{d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i\mathbf{q}^{\pm} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \left[\mathbf{q}^{\pm} \mathbf{q}^{\pm} - \kappa^2 \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \right], \quad (\phi'.31)$$

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

Στη συνέχεια θα εκφράσουμε τη συνάρτηση Green στη βάση των σφαιρικών λύσεων της Εξ. (ϕ'.23), η οποία είναι χρήσιμη στην περίπτωση που ενδιαφερόμαστε να εξετάσουμε δομές αποτελούμενες από μη αλληλεπικαλυπτόμενους σφαιρικούς σκεδαστές. Για δεδομένο κυματά-
νυσμα \mathbf{q} οι διαμήχεις σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις με αντίστοιχη ιδιοσυχνότητα μηδέν είναι

$$\mathcal{C}_0 \sqrt{\varepsilon V} \mathbf{E}_{L\ell m q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q} \nabla [f_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})], \quad (\phi'.32)$$

με $f_{\ell}(qr)$ έναν οποιοδήποτε γραμμικό συνδυασμό των $j_{\ell}(qr)$ και $h_{\ell}^+(qr)$. Οι εγκάρσιες σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις με αντίστοιχη ιδιοσυχνότητα $cq/\sqrt{\varepsilon\mu}$ είναι

$$\mathcal{C}_0 \sqrt{\varepsilon V} \mathbf{E}_{E\ell m q}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times [f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})]. \quad (\phi'.33)$$

και

$$\mathcal{C}_0 \sqrt{\varepsilon V} \mathbf{E}_{H\ell m q}(\mathbf{r}) = f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\phi'.34)$$

Και πάλι, όταν οι σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις γράφονται στην παραπάνω μορφή θα αναφερόμαστε σε αυτές ως αδιάστατες ιδιοσυναρτήσεις, κατ' αναλογία με τις Εξ. (ϕ'.24).

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

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{L\ell m\mathbf{q}}^{\hat{\mathbf{q}}\mathbf{p}} \mathbf{E}_{L\ell m\mathbf{q}}^0(\mathbf{r}) + \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[a_{E\ell m\mathbf{q}}^{\hat{\mathbf{q}}\mathbf{p}} \mathbf{E}_{E\ell m\mathbf{q}}^0(\mathbf{r}) + a_{H\ell m\mathbf{q}}^{\hat{\mathbf{q}}\mathbf{p}} \mathbf{E}_{H\ell m\mathbf{q}}^0(\mathbf{r}) \right]. \quad (\phi'.35)$$

Επειδή ένα επίπεδο κύμα είναι παντού πεπερασμένο, τα $\mathbf{E}_{P\ell m\mathbf{q}}^0(\mathbf{r})$ στις Εξ. (ϕ'.35) δίνονται από τις Εξ. (ϕ'.32), (ϕ'.33), και (ϕ'.34) με $f_{\ell}(qr) = j_{\ell}(qr)$. Οι μη μηδενικοί συντελεστές στην Εξ. (ϕ'.35) δίνονται από τις

$$\begin{aligned} a_{L\ell m}^{\hat{\mathbf{q}}0} &= 4\pi i^{\ell-1} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \\ a_{H\ell m}^{\hat{\mathbf{q}}1} &= -a_{E\ell m}^{\hat{\mathbf{q}}2} = 4\pi i^{\ell} \mathbf{X}_{\ell m 2}^*(\hat{\mathbf{q}}) \\ a_{H\ell m}^{\hat{\mathbf{q}}2} &= a_{E\ell m}^{\hat{\mathbf{q}}1} = 4\pi i^{\ell} \mathbf{X}_{\ell m 3}^*(\hat{\mathbf{q}}), \end{aligned} \quad (\phi'.36)$$

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

Θα εκφράσουμε τώρα τη συνάρτηση Green συναρτήσει των σφαιρικών κυμάτων από την Εξ. (ϕ'.27) ως εξής. Αναπτύσσουμε τα επίπεδα κύματα σε σφαιρικά μέσω των Εξ. (ϕ'.35) και (ϕ'.36) και ολοκληρώνουμε σε όλες τις στερεές γωνίες $\Omega_{\hat{\mathbf{q}}}$, χρησιμοποιώντας τις αναλυτικές εκφράσεις για τα $C_0\sqrt{\varepsilon V} \mathbf{E}_{P\ell m\mathbf{q}}^0(\mathbf{r})$ [Εξ. (ϕ'.32)-(ϕ'.34)] και τις ιδιότητες ορθογωνιότητας (Γ'.9), (Γ'.37), και (Γ'.38), οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \frac{2}{\pi\omega^2} \int_0^{\infty} dq \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \nabla [j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \nabla' [j_{\ell}(qr') Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}')] \right. \\ &+ \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - q^2} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left\{ \nabla \times [j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \nabla' \times [j_{\ell}(qr') \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}')] \right. \\ &\left. \left. + q^2 j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) j_{\ell}(qr') \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (\phi'.37)$$

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 παραγωγή με την ολοκλήρωση. Οι δύο πρώτοι όροι της Εξ. (ϕ'.37) αναπτύσσονται ως εξής (βλ. παράρτημα Γ')

$$\begin{aligned} \nabla [j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \nabla' [j_{\ell}(qr') Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}')] &= q^2 j'_{\ell}(qr) j'_{\ell}(qr') Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \\ &+ q j'_{\ell}(qr) j_{\ell}(qr') Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \\ &+ q j_{\ell}(qr) j'_{\ell}(qr') \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \\ &+ j_{\ell}(qr) j_{\ell}(qr') \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \end{aligned} \quad (\phi'.38)$$

και

$$\nabla \times [j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \nabla' \times [j_{\ell}(qr') \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}')] = \frac{\ell(\ell+1)}{rr'} j_{\ell}(qr) j_{\ell}(qr') Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}'$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{r} j_\ell(qr) [qr' j_\ell(qr')] Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \\
& + [qr j_\ell(qr)]' \frac{1}{r'} j_\ell(qr') \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \\
& + \frac{[qr j_\ell(qr)]' [qr' j_\ell(qr')]'}{\ell(\ell+1)} \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') , \\
\end{aligned} \tag{ε'.39}$$

όπου ο τόνος υπονοεί παραγώγιση ως προς το όρισμα της αντίστοιχης σφαιρικής συνάρτησης Bessel ή Hankel. Αντικαθιστώντας τις Εξ. (ε'.38) και (ε'.39) στην (ε'.37) προκύπτει

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) & = \frac{2}{\pi \omega^2} \int_0^\infty dq \left\{ \sum_{\ell=0}^\infty q^2 j_{\ell+1}(qr) j_{\ell+1}(qr') \sum_{m=-\ell}^\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \right. \\
& + \sum_{\ell=1}^\infty \frac{\partial [q j_\ell(qr) j_\ell(qr')]}{\partial q} \sum_{m=-\ell}^\ell \left[\frac{\ell}{r r'} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' + \frac{1}{r} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \right. \\
& + \left. \frac{1}{r'} \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \right] + \frac{q^2}{\kappa^2 - q^2} \sum_{\ell=1}^\infty \sum_{m=-\ell}^\ell \left\{ \frac{\ell(\ell+1)}{r r'} j_\ell(qr) j_\ell(qr') Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \right. \\
& \times Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' + [qr j_\ell(qr)]' \frac{1}{r'} j_\ell(qr') \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' + \frac{[qr j_\ell(qr)]' [qr' j_\ell(qr')]'}{\ell(\ell+1)} \\
& \times \left. \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \nabla' Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \right\} + \sum_{\ell=1}^\infty \left\{ j_\ell(qr) j_\ell(qr') + \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - q^2} \frac{[qr j_\ell(qr)]' [qr' j_\ell(qr')]'}{\ell(\ell+1)} \right\} \\
& \times \left. \sum_{m=-\ell}^\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \hat{\mathbf{r}}' \right\} . \\
\end{aligned} \tag{ε'.40}$$

Η ολοκλήρωση στο πρώτο άπειρο άθροισμα μπορεί να γίνει με χρήση της ταυτότητας [83]

$$\int_0^\infty dq q^2 j_\ell(qr) j_\ell(qr') = \frac{\pi}{2r^2} \delta(r - r') . \tag{ε'.41}$$

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

$$\int_0^\infty dq j_\ell(qr) j_\ell(qr') = \frac{\pi}{2(2\ell+1)} \frac{r_\leq^\ell}{r_\>^{\ell+1}} , \tag{ε'.42}$$

$$\int_0^\infty dq q^2 \frac{j_\ell(qr) j_\ell(qr')}{\kappa^2 - q^2} = -i \frac{\pi \kappa}{2} j_\ell(\kappa r_\leq) h_\ell^+(\kappa r_\>) , \tag{ε'.43}$$

$$\int_0^\infty dq \kappa^2 \frac{[qr j_\ell(qr)]' [qr' j_\ell(qr')]'}{\kappa^2 - q^2} = -\frac{\pi \ell(\ell+1)}{2(2\ell+1)} \frac{r_\leq^\ell}{r_\>^{\ell+1}} -$$

$$- i \frac{\pi \kappa}{2} [qr_{<} j_{\ell}(qr_{<})]' [qr_{>} h_{\ell}^{+}(qr_{>})]' , \quad (\varepsilon'.44)$$

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

$$\int_0^{\infty} dq q^2 \frac{j_{\ell}(qr) [qr' j_{\ell}(qr')]'}{\kappa^2 - q^2} = -i \frac{\pi \kappa}{2} \left\{ j_{\ell}(\kappa r) [\kappa r' h_{\ell}^{+}(\kappa r')]' \Theta(r' - r) + h_{\ell}^{+}(\kappa r) [\kappa r' j_{\ell}(\kappa r')]' \Theta(r - r') \right\} , \quad (\varepsilon'.45)$$

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

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x < 0 \\ \frac{1}{2}, & \text{για } x = 0 \\ 1, & \text{για } x > 0 \end{cases} . \quad (\varepsilon'.46)$$

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

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \frac{-i}{\omega^2} \left(\frac{\omega^2 \varepsilon \mu}{c^2} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{L}} [\mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}) \overline{\mathbf{J}}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}') \Theta(r - r') + \mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}) \overline{\mathbf{H}}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}') \Theta(r' - r)] \\ &+ \frac{\widehat{\mathbf{r}}}{\omega^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \end{aligned} \quad (\varepsilon'.47)$$

όπου ορίσαμε την πράξη $\overline{\mathbf{E}}_{P\ell m}(\mathbf{r}) = (-1)^f \mathbf{E}_{P\ell - m}(\mathbf{r})$, με $f = m$ αν $P = E$ και $f = m + 1$ αν $P = H$. Η πράξη αυτή, όπως ορίστηκε, ισοδυναμεί με την εφαρμογή της μιγαδικής συζυγίας μόνο στα γωνιακά τμήματα των διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων. Λόγω της $\sum_m Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\widehat{\mathbf{r}}') = \sum_m Y_{\ell m}^*(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}}')$, η μιγαδική συζυγία στην Εξ. (ε'.37) μπορεί να εφαρμοστεί είτε στην $Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}})$, είτε στην $Y_{\ell m}(\widehat{\mathbf{r}}')$. Συνεπώς, στην Εξ. (ε'.47) 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. (ε'.23) 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 (ε'.47) ισχύει και σε αυτές τις περιπτώσεις.

Παράρτημα Ζ'

Αλλαγή βάσης κυμάτων

Για την απόδειξη της σχέσης

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) h_{\ell}^{+}(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi (-i)^{\ell}}{qA_0 K_{gz}^{+}} Y_{\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{Z'.1})$$

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

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q^2}. \quad (\text{Z'.2})$$

Περνώντας από τον διακριτό χώρο \mathbf{q} στον συνεχή θα έχουμε

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3q \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2q_{\parallel} \int dq_z \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_{\parallel}^2 - q_z^2} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}']_{\parallel})}{2\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \int dq_z \exp(iq_z [z - z']) \\ &\times \left[\frac{1}{q_z - \sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_{\parallel}^2}} - \frac{1}{q_z + \sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_{\parallel}^2}} \right], \quad (\text{Z'.3}) \end{aligned}$$

όπου ο δείκτης \parallel δηλώνει συλλογικά τις συνιστώσες x, y ενός διανύσματος. Υπολογίζοντας με τη βοήθεια του λήμματος Jordan τα δύο ολοκληρώματα στην αγκύλη¹, βρίσκουμε

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \frac{i}{2(2\pi)^2} \int d^2q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}}, \quad (\text{Z'.4})$$

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

$$\mathbf{q}_{\pm} = \mathbf{q}_{\parallel} \pm \sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2} \hat{\mathbf{z}}, \quad +(-) \text{ για } z - z' > 0 (< 0). \quad (Z'.5)$$

Επειδή τα \mathbf{r}, \mathbf{r}' είναι αυθαίρετα μπορούμε να επιλέξουμε το \mathbf{r}' στο επίπεδο $x - y$, ώστε η Εξ. (Z'.5) να ισχύει για τη σύμβαση $+(-)$ για $z > (<) 0$. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (2.48) και (Γ'.8) η Εξ. (Z'.4) θα γίνει

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell m} (-i)^{\ell+1} j_{\ell}(\kappa r') Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \int d^2 q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}_{\pm}). \quad (Z'.6)$$

Όμως η συνάρτηση Green για $r' > r$ (εφόσον τα \mathbf{r}, \mathbf{r}' είναι αυθαίρετα) δίνεται από την έκφραση [βλ. Εξ. (2.49)]

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = -\frac{\exp(i\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -i\kappa \sum_{\ell m} j_{\ell}(\kappa r') h_{\ell}^+(\kappa r) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}'). \quad (Z'.7)$$

Με σύγκριση των δύο τελευταίων σχέσεων, και εκμεταλλευόμενοι την ορθογωνιότητα των σφαιρικών αρμονικών, Εξ. (Γ'.9), παίρνουμε

$$h_{\ell}^+(\kappa r) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{(-i)^{\ell}}{2\pi\kappa} \int d^2 q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}_{\pm}), \quad (Z'.8)$$

από όπου, για $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_n$, έχουμε

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) h_{\ell}^+(\kappa r_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \frac{(-i)^{\ell}}{2\pi\kappa} \int d^2 q_{\parallel} \frac{Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}_{\pm})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \\ &\times \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}_n]). \end{aligned} \quad (Z'.9)$$

Όμως, επειδή $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$, με \mathbf{R}_n στο επίπεδο $x - y$, με τη βοήθεια της Εξ. (Z'.5) θα ισχύει

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}_n]) = \exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}] \cdot \mathbf{R}_n), \quad (Z'.10)$$

και λόγω της

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}] \cdot \mathbf{R}_n) = \frac{(2\pi)^2}{A_0} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{g}), \quad (Z'.11)$$

οι Εξ. (Z'.9) και (Z'.10) δίνουν για $\mathbf{q}_{\pm} \rightarrow \mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ τη ζητούμενη σχέση, Εξ. (Z'.1). Η Εξ. (Z'.11) μπορεί να αποδειχτεί ξεκινώντας από τη σχέση [126]

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) = \begin{cases} N, & \mathbf{k} = \mathbf{g} \\ 0, & \mathbf{k} \neq \mathbf{g} \end{cases} = N \sum_{\mathbf{g}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{g}}, \quad \mathbf{k}: \text{ διακριτό}, \quad (Z'.12)$$

όπου \mathbf{R}_n και \mathbf{g} , είναι διανύσματα του ευθέος και του αντίστροφου πλέγματος, αντίστοιχα, N είναι το πλήθος των πλεγματικών σημείων, και $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{g}}$ το δέλτα του Kronecker, οπότε θα είναι

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{g}} = 1 . \quad (Z'.13)$$

Αν περάσουμε από τον διάκριτο χώρο \mathbf{k} στον συνεχή, η τελευταία σχέση παίρνει τη μορφή

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{g}})_{\text{συνεχ.}} = 1 . \quad (Z'.14)$$

Όμως γνωρίζουμε ότι

$$\int d^3k \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) = 1 , \quad (Z'.15)$$

οπότε με σύγκριση των δύο τελευταίων παίρνουμε

$$(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{g}})_{\text{συνεχ.}} = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) . \quad (Z'.16)$$

Έτσι, από την τελευταία και λαμβάνοντας υπόψη ότι $V = NV_0$, όπου V_0 ο όγκος της θεμελιώδους κυψελίδας, η Εξ. (Z'.12) γράφεται

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) = \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) . \quad (Z'.17)$$

Η παραπάνω απόδειξη αφορούσε ένα 3Δ σύστημα. Αντίστοιχα μπορεί κανείς να δουλέψει και στις δύο διαστάσεις, οπότε θα πάρει την Εξ. (Z'.11), με την αντιστοίχιση $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}$.

Βιβλιογραφία

- [1] V. Veselago, *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
- [2] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley, 1983).
- [3] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media, 2nd Edition* (Butterworth-Heinemann, 1984).
- [4] J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, *IEEE Trans. Microw. Theor. Techn.* **47**, 2075 (1999).
- [5] D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4184 (2000).
- [6] R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz, *Science* **292**, 77 (2001).
- [7] J. B. Pendry, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3966 (2000).
- [8] M. Ambati, N. Fang, C. Sun, and X. Zhang, *Phys. Rev. B* **75**, 195447 (2007).
- [9] D. Torrent and J. Sánchez-Dehesa, *New J. Phys.* **9**, 323 (2007).
- [10] H. Chen and C. T. Chan, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183518 (2007).
- [11] S. Guenneau, A. Movchan, G. Pétursson, and S. A. Ramakrishna, *New J. Phys.* **9**, 399 (2007).
- [12] V. M. Shalaev, *Nature Photon.* **1**, 41 (2007).
- [13] R. Marqués, J. Martel, F. Mesa, and F. Medina, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 183901 (2002).
- [14] N. Katsarakis, T. Koschny, M. Kafesaki, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2943 (2004).
- [15] J. Zhou, T. Koschny, M. Kafesaki, E. N. Economou, J. B. Pendry, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 223902 (2005).
- [16] C. Rockstuhl, F. Lederer, C. Etrich, T. Zentgraf, J. Kuhl, and H. Giessen, *Opt. Express* **14**, 8827 (2006).

- [17] C. Rockstuhl, T. Paul, F. Lederer, T. Pertsch, T. Zentgraf, T. P. Meyrath, and H. Giessen, *Phys. Rev. B* **77**, 035126 (2008).
- [18] G. Dolling, C. Enkrich, M. Wegener, J. F. Zhou, C. M. Soukoulis, and S. Linden, *Opt. Lett.* **30**, 3198 (2005).
- [19] B. Kanté, S. N. Burokur, A. Sellier, A. de Lustrac, and J.-M. Lourtioz, *Phys. Rev. B* **79**, 075121 (2009).
- [20] V. A. Podolskiy, A. K. Sarychev, and V. M. Shalaev, *Opt. Express* **11**, 735 (2003).
- [21] W. Park and Q. Wu, *Solid State Commun.* **146**, 221 (2008).
- [22] V. M. Shalaev, W. Cai, U. K. Chettiar, H.-K. Yuan, A. K. Sarychev, V. P. Drachev, and A. V. Kildishev, *Opt. Lett.* **30**, 3356 (2005).
- [23] G. Shvets and Y. A. Urzhumov, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **8**, S122 (2006).
- [24] U. K. Chettiar, A. V. Kildishev, T. A. Klar, and V. M. Shalaev, *Opt. Express* **14**, 7872 (2006).
- [25] W. Cai, U. K. Chettiar, H.-K. Yuan, V. C. de Silva, A. V. Kildishev, V. P. Drachev, and V. M. Shalaev, *Opt. Express* **15**, 3333 (2007).
- [26] K. H. Su, Q. H. Wei, and X. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 063118 (2006).
- [27] T. Pakizeh, M. S. Abrishamian, N. Granpayeh, A. Dmitriev, and M. Käll, *Opt. Express* **14**, 8240 (2006).
- [28] A. Dmitriev, T. Pakizeh, M. Käll, and D. S. Sutherland, *Small* **3**, 294 (2007).
- [29] T. Pakizeh, A. Dmitriev, M. S. Abrishamian, N. Granpayeh, and M. Käll, *J. Opt. Soc. Am. B* **25**, 659 (2008).
- [30] C. Tserkezis, N. Papanikolaou, G. Gantzounis, and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **78**, 165114 (2008).
- [31] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals and Applications* (Springer, 2007).
- [32] M. S. Wheeler, J. S. Aitchison, and M. Mojahedi, *Phys. Rev. B* **72**, 193103 (2005).
- [33] V. Yannopoulos and A. Moroz, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 3717 (2005).
- [34] A. García-Etxarri, R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, C. López, L. Chantada, F. Scheffold, J. Aizpurua, M. Nieto-Vesperinas, and J. J. Sáenz, *Opt. Express* **19**, 4815 (2011).
- [35] R. Tao, Z. Chen, and P. Sheng, *Phys. Rev. B* **41**, 2417 (1990).
- [36] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **48**, 14936 (1993).

- [37] A. A. Krokhin, P. Halevi, and J. Arriaga, *Phys. Rev. B* **65**, 115208 (2002).
- [38] A. I. Căbuz, D. Felbacq, and D. Cassagne, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 037403 (2007).
- [39] M. G. Silveirinha, *Phys. Rev. B* **75**, 115104 (2007).
- [40] C. Tserkezis and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **81**, 115112 (2010).
- [41] J. A. Reyes-Avendaño, U. Algreto-Badillo, P. Halevi, and F. Pérez-Rodríguez, *New J. Phys.* **13**, 073041 (2011).
- [42] J. C. Maxwell-Garnett, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **203**, 385 (1904).
- [43] D. A. G. Bruggeman, *Ann. Phys. (Leipzig)* **24**, 636 (1935).
- [44] D. R. Smith, S. Schultz, P. Markoš, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **65**, 195104 (2002).
- [45] X. Chen, T. M. Grzegorzcyk, B.-I. Wu, J. Pacheco Jr., and J. A. Kong, *Phys. Rev. E* **70**, 016608 (2004).
- [46] D. R. Smith, D. C. Vier, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. E* **71**, 036617 (2005).
- [47] T. Koschny, P. Markoš, E. N. Economou, D. R. Smith, D. C. Vier, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **71**, 245105 (2005).
- [48] J. Huangfu, L. Ran, H. Chen, X.-M. Zhang, K. Chen, T. M. Grzegorzcyk, and J. A. Kong, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1537 (2004).
- [49] G. Dolling, C. Enkrich, M. Wegener, C. M. Soukoulis, and S. Linden, *Science* **312**, 892 (2006).
- [50] G. Dolling, M. Wegener, C. M. Soukoulis, and S. Linden, *Opt. Lett.* **32**, 53 (2007).
- [51] J. Valentine, S. Zhang, T. Zentgraf, E. Ulin-Avila, D. A. Genov, G. Bartal, and X. Zhang, *Nature* **455**, 376 (2008).
- [52] C. M. Soukoulis and M. Wegener, *Nature Photon.* **5**, 523 (2011).
- [53] Y. Lai, J. Ng, H. Y. Chen, D. Z. Han, J. J. Xiao, Z.-Q. Zhang, and C. T. Chan, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 253902 (2009).
- [54] H. Chen, C. T. Chan, and P. Sheng, *Nature Mater.* **9**, 387 (2010).
- [55] D. Schurig, J. J. Mock, B. J. Justice, S. A. Cummer, J. B. Pendry, A. F. Starr, and D. R. Smith, *Science* **314**, 977 (2006).
- [56] A. Alù and N. Engheta, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **10**, 093002 (2008).

- [57] S. Enoch, G. Tayeb, P. Sabouroux, N. Guérin, and P. Vincent, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 213902 (2002).
- [58] N. I. Landy, S. Sajuyigbe, J. J. Mock, D. R. Smith, and W. J. Padilla, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 207402 (2008).
- [59] 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).
- [60] N. Papasimakis, V. A. Fedotov, N. I. Zheludev, and S. L. Prosvirnin, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 253903 (2008).
- [61] N. Fang and X. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 161 (2003).
- [62] N. Fang, H. Lee, C. Sun, and X. Zhang, *Science* **308**, 534 (2005).
- [63] A. Ono, J.-I. Kato, and S. Kawata, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 267407 (2005).
- [64] K. Aydin, I. Bulu, and E. Ozbay, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 254102 (2007).
- [65] S. Kawata, A. Ono, and P. Verma, *Nature Photon.* **2**, 438 (2008).
- [66] Z. Jacob, L. V. Alekseyev, and E. Narimanov, *Opt. Express* **14**, 8247 (2006).
- [67] D. R. Smith, D. Schurig, J. J. Mock, P. Kolinko, and P. Rye, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2244 (2004).
- [68] M. Notomi, *Opt. Quant. Electron.* **34**, 133 (2002).
- [69] C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and J. B. Pendry, *Phys. Rev. B* **65**, 201104(R) (2002).
- [70] E. Cubukcu, K. Aydin, E. Ozbay, S. Foteinopoulou, and C. M. Soukoulis, *Nature* **423**, 604 (2003).
- [71] M. Notomi, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 096501 (2010).
- [72] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, 1995).
- [73] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals, 2nd Edition* (Springer, 2001).
- [74] H. S. Sözüer, J. W. Haus, and R. Inguva, *Phys. Rev. B* **45**, 13962 (1992).
- [75] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd Edition* (Artech House, 2005).
- [76] J. B. Pendry and A. MacKinnon, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2772 (1992).
- [77] P. M. Bell, J. B. Pendry, L. Martín Moreno, and A. J. Ward, *Comput. Phys. Commun.* **85**, 306 (1995).

- [78] A. Moroz, Phys. Rev. B **51**, 2068 (1995).
- [79] B. T. Draine and P. J. Flatau, J. Opt. Soc. Am. A **11**, 1491 (1994).
- [80] N. Stefanou and A. Modinos, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 8135 (1991).
- [81] N. Stefanou, V. Yannopoulos, and A. Modinos, Comput. Phys. Commun. **113**, 49 (1998).
- [82] N. Stefanou, V. Yannopoulos, and A. Modinos, Comput. Phys. Commun. **132**, 189 (2000).
- [83] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics, 3rd Edition* (Wiley, 1999).
- [84] M. W. McCall, A. Lakhtakia, and W. S. Weiglhofer, Eur. J. Phys. **23**, 353 (2002).
- [85] R. A. Depine and A. Lakhtakia, Microw. Opt. Technol. Lett. **41**, 315 (2004).
- [86] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light, 7th Edition* (Cambridge University Press, 1999).
- [87] I. V. Lindell, S. A. Tretyakov, K. I. Nikoskinen, and S. Ilvonen, Microw. Opt. Technol. Lett. **31**, 129 (2001).
- [88] D. R. Smith and D. Schurig, Phys. Rev. Lett. **90**, 077405 (2003).
- [89] J. Schilling, Phys. Rev. E **74**, 046618 (2006).
- [90] C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and J. B. Pendry, Phys. Rev. B **68**, 045115 (2003).
- [91] W. C. Chew, *Waves and Fields in Inhomogeneous Media* (IEEE Press, 1995).
- [92] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists, 6th Edition* (Academic Press, 2005).
- [93] Γ. Γκαντζούνης, *Οπτικές Ιδιότητες Σύνθετων Φωτονικών Συστημάτων, Διδακτορική Διατριβή* (Αθήνα, 2008).
- [94] G. Gantounis and N. Stefanou, Phys. Rev. B **73**, 035115 (2006).
- [95] Χ. Τσερκέζης, *Σκέδαση Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας από Πολυστρωματικούς Σφαιρικούς Σκεδαστές, Διπλωματική Εργασία* (Αθήνα, 2005).
- [96] Χ. Τσερκέζης, *Οπτικές Ιδιότητες Περιοδικών Δομών Μεταλλικών Νανοφλοιών, Ερευνητική Εργασία ΜΔΕ* (Αθήνα, 2007).
- [97] C. Tserkezis, G. Gantounis, and N. Stefanou, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 075232 (2008).

- [98] N. Stefanou, C. Tserkezis, and G. Gantzounis, Proc. SPIE **6989**, 698910 (2008).
- [99] C. Tserkezis, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **84**, 115455 (2011).
- [100] C. Tserkezis and N. Stefanou, J. Opt. **12**, 115103 (2010).
- [101] C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, J. Opt. Soc. Am. B **27**, 2620 (2010).
- [102] C. Tserkezis and N. Stefanou, Metamaterials **5**, 169 (2011).
- [103] G. Mie, Ann. Phys. **25**, 377 (1908).
- [104] P. Debye, Ann. Phys. **30**, 57 (1909).
- [105] Z. S. Wu and Y. P. Wang, Radio Sci. **26**, 1393 (1991).
- [106] A. Moroz, Ann. Phys. **315**, 352 (2005).
- [107] N. L. Tsitsas and C. Athanasiadis, Q. J. Mech. Appl. Math. **59**, 55 (2006).
- [108] A. R. Melnyk and M. J. Harrison, Phys. Rev. Lett. **21**, 85 (1968).
- [109] R. Ruppin, J. Chem. Phys. **76**, 1681 (1982).
- [110] J. M. McMahon, S. K. Gray, and G. C. Schatz, Phys. Rev. Lett. **103**, 097403 (2009).
- [111] J. M. McMahon, S. K. Gray, and G. C. Schatz, Phys. Rev. B **82**, 035423 (2010).
- [112] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, and A. A. Lacis, *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles* (Cambridge University Press, 2002).
- [113] A. Moroz, Appl. Opt. **44**, 3604 (2005).
- [114] J. F. Cornwell, *Group Theory in Physics* (Academic, 1984).
- [115] A. Gonis, *Green Functions for Ordered and Disordered Systems* (North-Holland, 1992).
- [116] J. Korringa, Physica **13**, 392 (1947).
- [117] W. Kohn and N. Rostoker, Phys. Rev. **94**, 1111 (1954).
- [118] F. S. Ham and B. Segall, Phys. Rev. **124**, 1786 (1961).
- [119] K. Kambe, Z. Naturforsch. **22a**, 322 (1967).
- [120] J. B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction: The Theory and Its Application to Determination of Surface Structure* (Academic Press, 1974).
- [121] N. G. van Kampen, Phys. Rev. **89**, 1072 (1953).

- [122] E. G. McRae, *Surf. Sci.* **11**, 479 (1968).
- [123] E. G. McRae, *Surf. Sci.* **11**, 492 (1968).
- [124] L. C. Botten, N. A. Nicorovici, R. C. McPhedran, C. M. de Sterke, and A. A. Asatryan, *Phys. Rev. E* **64**, 046603 (2001).
- [125] Z.-Y. Li and K.-M. Ho, *Phys. Rev. B* **68**, 155101 (2003).
- [126] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Brooks/Cole, 1976).
- [127] A. L. Efros, *Phys. Rev. E* **70**, 048602 (2004).
- [128] L. Hu and S. T. Chui, *Phys. Rev. B* **66**, 085108 (2002).
- [129] L. Zhou, C. T. Chan, and P. Sheng, *Phys. Rev. B* **68**, 115424 (2003).
- [130] X. Chen, B.-I. Wu, J. A. Kong, and T. M. Grzegorzczuk, *Phys. Rev. E* **71**, 046610 (2005).
- [131] X. L. Chen, M. He, Y. X. Du, W. Y. Wang, and D. F. Zhang, *Phys. Rev. B* **72**, 113111 (2005).
- [132] N.-H. Shen, Q. Wang, J. Chen, Y.-X. Fan, J. Ding, H. T. Wang, Y. Tian, and N.-B. Ming, *Phys. Rev. B* **72**, 153104 (2005).
- [133] W. T. Lu and S. Sridhar, *Phys. Rev. B* **77**, 233101 (2008).
- [134] N.-H. Shen, S. Foteinopoulou, M. Kafesaki, T. Koschny, E. Ozbay, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **80**, 115123 (2009).
- [135] R. Ruppin, *Opt. Commun.* **182**, 273 (2000).
- [136] B. N. J. Persson and A. Liebsch, *Phys. Rev. B* **28**, 4247 (1983).
- [137] C. K. Lo, J. T. K. Wan, and K. W. Yu, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 1315 (2001).
- [138] C. R. Simovski and S. A. Tretyakov, *Phys. Rev. B* **75**, 195111 (2007).
- [139] A. Rose, S. Larouche, D. Huang, E. Poutrina, and D. R. Smith, *Phys. Rev. E* **82**, 036608 (2010).
- [140] C. Fietz and G. Shvets, *Phys. Rev. B* **82**, 205128 (2010).
- [141] I. Tsukerman, *J. Opt. Soc. Am. B* **28**, 577 (2011).
- [142] J. T. Costa, M. G. Silveirinha, and S. I. Maslovski, *Phys. Rev. B* **80**, 235124 (2009).
- [143] S. Riikonen, I. Romero, and F. J. García de Abajo, *Phys. Rev. B* **71**, 235104 (2005).
- [144] I. Romero and F. J. García de Abajo, *Opt. Express* **17**, 22012 (2009).

- [145] G. P. Ortiz, B. E. Martínez-Zérega, B. S. Mendoza, and W. L. Mochán, *Phys. Rev. B* **79**, 245132 (2009).
- [146] C. Menzel, C. Rockstuhl, T. Paul, F. Lederer, and T. Pertsch, *Phys. Rev. B* **77**, 195328 (2008).
- [147] C. Tserkezis, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 155404 (2009).
- [148] S. B. Raghunathan and N. V. Budko, *Phys. Rev. B* **81**, 054206 (2010).
- [149] X.-X. Liu, D. A. Powell, and A. Alù, *Phys. Rev. B* **84**, 235106 (2011).
- [150] M. Bass (Ed.), *Handbook of Optics, 3rd Edition* (McGraw-Hill, 2010).
- [151] G. Gantzounis and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **72**, 075107 (2005).
- [152] Y. Liu, G. Bartal, and X. Zhang, *Opt. Express* **16**, 15439 (2008).
- [153] F. Abelès, Y. Borensztein, and T. López-Rios, *Festkörperprobleme - Adv. Solid St. Phys.* **24**, 93 (1984).
- [154] J. Venermo and A. Sihvola, *J. Electrostat.* **63**, 101 (2005).
- [155] F. L. Galeener, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 421 (1971).
- [156] R. W. Cohen, G. D. Cody, M. D. Coutts, and B. Abeles, *Phys. Rev. B* **8**, 3689 (1973).
- [157] A. Andryieuski, R. Malureanu, and A. V. Lavrinenko, *Phys. Rev. B* **80**, 193101 (2009).
- [158] C. Tserkezis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Opt. Commun.* **283**, 4074 (2010).
- [159] T. Koschny, P. Markoš, D. R. Smith, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. E* **68**, 065602(R) (2003).
- [160] J. Kanungo and J. Schilling, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 021903 (2010).
- [161] N. Stefanou and A. Modinos, *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 8149 (1991).
- [162] E. Prodan, C. Radloff, N. J. Halas, and P. Nordlander, *Science* **302**, 419 (2003).
- [163] T. V. Teperik, V. V. Popov, and F. J. García de Abajo, *Phys. Rev. B* **69**, 155402 (2004).
- [164] S. J. Oldenburg, R. D. Averitt, S. L. Westcott, and N. J. Halas, *Chem. Phys. Lett.* **288**, 243 (1998).
- [165] P. Barnickel, and A. Wokaun, *Mol. Phys.* **67**, 1355 (1989).
- [166] H. S. Zhou, I. Honma, H. Komiyama, and J. W. Haus, *Phys. Rev. B* **50**, 12052 (1994).

- [167] S. G. Romanov, A. S. Susha, C. M. Sotomayor Torres, Z. Liang, and F. Caruso, *J. Appl. Phys.* **97**, 086103 (2005).
- [168] N. Phonthammachai, J. C. Y. Kah, G. Jun, C. J. R. Sheppard, M. C. Olivo, S. G. Mhaisalkar, and T. J. White, *Langmuir* **24**, 5109 (2008).
- [169] J. R. Cole and N. J. Halas, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 153120 (2006).
- [170] J. U. Kang, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 221112 (2006).
- [171] X.-W. Chen, W. C. H. Choy, S. He, and P. C. Chui, *Opt. Express* **15**, 7083 (2007).
- [172] R. Bardhan, N. K. Grady, J. R. Cole, A. Joshi, and N. J. Halas, *ACS Nano* **3**, 744 (2009).
- [173] H. Wang, K. Fu, R. A. Drezek, and N. J. Halas, *Appl. Phys. B* **84**, 191 (2006).
- [174] C. Wu, X. Liang, and H. Jiang, *Opt. Commun.* **253**, 214 (2005).
- [175] C. Loo, A. Lowery, N. Halas, J. West, and R. Drezek, *Nano Lett.* **5**, 709 (2005).
- [176] B. Khlebtsov, V. Zharov, A. Melnikov, V. Tuchin, and N. Khlebtsov, *Nanotechnology* **17**, 5167 (2006).
- [177] S. M. Wang, J. J. Xiao, and K. W. Yu, *Opt. Commun.* **279**, 384 (2007).
- [178] Y.-F. Chau, H.-H. Yeh, C.-Y. Liu, and D. P. Tsai, *Opt. Commun.* **283**, 3189 (2010).
- [179] C. Graf and A. van Blaaderen, *Langmuir* **18**, 524 (2002).
- [180] P. Zhan, J. B. Liu, W. Dong, H. Dong, Z. Chen, Z. L. Wang, Y. Zhang, S. N. Zhu, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 051108 (2005).
- [181] S. Uchida, K. Yamamura, and N. Zettsu, *Thin Solid Films* **518**, 3581 (2010).
- [182] A. O. Pinchuk and G. C. Schatz, *Appl. Phys. B* **93**, 31 (2008).
- [183] C. Tang, Z. Wang, W. Zhang, S. Zhu, N. Ming, G. Sun, and P. Sheng, *Phys. Rev. B* **80**, 165401 (2009).
- [184] A. Rashidi and H. Mosallaei, *Phys. Rev. B* **82**, 035117 (2010).
- [185] J. A. Fan, C. Wu, K. Bao, J. Bao, R. Bardhan, N. J. Halas, V. M. Manoharan, P. Nordlander, G. Shvets, and F. Capasso, *Science* **328**, 1135 (2010).
- [186] M. Kerker and C. G. Blatchford, *Phys. Rev. B* **26**, 4052 (1982).
- [187] J. B. Jackson, S. L. Westcott, L. R. Hirsch, J. L. West, and N. J. Halas, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 257 (2003).
- [188] F. Le, D. W. Brandl, Y. A. Urzhumov, H. Wang, J. Kundu, N. J. Halas, J. Aizpurua, and P. Nordlander, *ACS Nano* **2**, 707 (2008).

- [189] V. Yannopapas, E. Paspalakis, and N. V. Vitanov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 063602 (2009).
- [190] A. Ahmadi, S. Ghadarghadr, and H. Mosallaei, *Opt. Express* **18**, 123 (2010).
- [191] B. Khlebtsov and N. Khlebtsov, *Nanotechnology* **19**, 435703 (2008).
- [192] V. Yannopapas, E. Paspalakis, and N. V. Vitanov, *Phys. Rev. B* **80**, 035104 (2009).
- [193] J. Zhang, X. Chen, W. Hu, J. Shao, W. Lu, and Z. Wang, *Solid State Commun.* **145**, 582 (2008).
- [194] W. Zhang, Z. Wang, A. Hu, and N. Ming, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 9361 (2000).
- [195] V. Yannopapas, A. Modinos, and N. Stefanou, *Opt. Quant. Electron.* **34**, 227 (2002).
- [196] J. Li, G. Sun, and C. T. Chan, *Phys. Rev. B* **73**, 075117 (2006).
- [197] A. Alù and N. Engheta, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 113901 (2008).
- [198] V. Yannopapas and N. V. Vitanov, *Phys. Stat. Sol. (RRL)* **2**, 287 (2008).
- [199] P. B. Johnson and R. W. Christy, *Phys. Rev. B* **6**, 4370 (1972).
- [200] G. Gantzounis and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **74**, 085102 (2006).
- [201] W. A. Kraus and G. C. Schatz, *J. Chem. Phys.* **79**, 6130 (1983).
- [202] R. Ruppin, *Phys. Rev. B* **11**, 2871 (1975).
- [203] R. Chang and P. T. Leung, *Phys. Rev. B* **73**, 125438 (2006).
- [204] E. M. Purcell, *Phys. Rev.* **69**, 681 (1946).
- [205] K. H. Drexhage, H. Kuhn, and F. P. Schäfer, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem. Lett.* **72**, 329 (1968).
- [206] K. H. Drexhage, *J. Lumin.* **1/2**, 693 (1970).
- [207] C. K. Carniglia, L. Mandel, and K. H. Drexhage, *J. Opt. Soc. Am.* **62**, 479 (1972).
- [208] R. R. Chance, A. Prock, and R. Silbey, *Adv. Chem. Phys.* **37**, 1 (1978).
- [209] E. Fort and S. Grésillon, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, 013001 (2008).
- [210] J. Gersten and A. Nitzan, *J. Chem. Phys.* **75**, 1139 (1981).
- [211] P. Anger, P. Bharadwaj, and L. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 113002 (2006).
- [212] S. Kühn, U. Håkanson, L. Rogobete, and V. Sandoghdar, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 017402 (2006).

- [213] L. A. Blanco and F. J. García de Abajo, *Phys. Rev. B* **69**, 205414 (2004).
- [214] T. Härtling, P. Reichenbach, and L. M. Eng, *Opt. Express* **15**, 12806 (2007).
- [215] V. Giannini and J. A. Sánchez-Gil, *Opt. Lett.* **33**, 899 (2008).
- [216] H. Mertens and A. Polman, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 211107 (2006).
- [217] J. R. Lakowicz, *Plasmonics* **1**, 5 (2006).
- [218] O. Kulakovich, N. Strekal, A. Yaroshevich, S. Maskevich, S. Gaponenko, I. Nabiev, U. Woggon, and M. Artemyev, *Nano Lett.* **2**, 1449 (2002).
- [219] V. K. Komarala, Y. P. Rakovich, A. L. Bradley, S. J. Byrne, Y. K. Gun'ko, N. Gaponik, and A. Eychmüller, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 253118 (2006).
- [220] F. Tam, G. P. Goodrich, B. R. Johnson, and N. J. Halas, *Nano Lett.* **7**, 496 (2007).
- [221] K. Ohtaka and Y. Tanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2670 (1996).
- [222] R. Sainidou and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **73**, 184301 (2006).
- [223] M. G. Blaber, M. D. Arnold, and M. J. Ford, *J. Phys. Chem. C* **113**, 3041 (2009).
- [224] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev. B* **44**, 10961 (1991).
- [225] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos *Opt. Lett.* **18**, 528 (1993).
- [226] P. Etchegoin and R. T. Phillips, *Phys. Rev. B* **53**, 12674 (1996).
- [227] J. M. Elson and P. Tran, *Phys. Rev. B* **54**, 1711 (1996).
- [228] X. Zhang, L.-M. Li, Z.-Q. Zhang, and C. T. Chan, *Phys. Rev. B* **63**, 125114 (2001).
- [229] M. Qiu and S. He, *Phys. Lett. A* **282**, 85 (2001).
- [230] S. Enoch, E. Popov, and N. Bonod, *Phys. Rev. B* **72**, 155101 (2005).
- [231] M. Che and Z.-Y. Li, *J. Opt. Soc. Am. A* **25**, 2177 (2008).
- [232] F. J. Lawrence, L. C. Botten, K. B. Dossou, R. C. McPhedran, and C. M. de Sterke, *Phys. Rev. A* **82**, 053840 (2010).
- [233] F. Ramos-Mendieta and P. Halevi, *Phys. Rev. B* **59**, 15112 (1999).
- [234] Y. A. Vlasov, N. Moll, and S. J. McNab, *Opt. Lett.* **29**, 2175 (2004).
- [235] J. B. Pendry, L. Martín-Moreno, and F. J. Garcia-Vidal, *Science* **305**, 847 (2004).

- [236] F. J. Garcia-Vidal, L. Martín-Moreno, and J. B. Pendry, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **7**, S97 (2005).
- [237] N. Malkova and C. Z. Ning, *Phys. Rev. B* **73**, 113113 (2006).
- [238] A. Namdar, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 114104 (2006).
- [239] A. P. Vinogradov, A. V. Dorofeenko, A. M. Merzlikin, and A. A. Lisyansky, *Phys. - Uspekhi* **53**, 243 (2010).
- [240] W. M. Robertson and M. S. May, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1800 (1999).
- [241] M. Shinn and W. M. Robertson, *Sensors and Actuators B* **105**, 360 (2005).
- [242] E. Moreno, F. J. García-Vidal, and L. Martín-Moreno, *Phys. Rev. B* **69**, 121402(R) (2004).
- [243] P. Kramper, M. Agio, C. M. Soukoulis, A. Birner, F. Müller, R. B. Wehrspohn, U. Gösele, and V. Sandoghdar, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 113903 (2004).
- [244] E. Moreno, L. Martín-Moreno, and F. J. García-Vidal, *Photon. Nanostruct. Fundam. Appl.* **2**, 97 (2004).
- [245] A. I. Rahachou and I. V. Zozoulenko, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1679 (2006).
- [246] W. Śmigaj, *Phys. Rev. B* **75**, 205430 (2007).
- [247] H. Caglayan, I. Bulu, and E. Ozbay, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 092114 (2008).
- [248] S. Xiao, M. Qiu, Z. Ruan, and S. He, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4269 (2004).
- [249] R. Chatterjee, N. C. Panoiu, K. Liu, Z. Dios, M. B. Yu, M. T. Doan, L. J. Kaufman, R. M. Osgood, and C. W. Wong, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 187401 (2008).
- [250] S. Foteinopoulou, M. Kafesaki, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **75**, 245116 (2007).
- [251] K. Ishizaki and S. Noda, *Nature* **460**, 367 (2009).
- [252] B. Wang, W. Dai, A. Fang, L. Zhang, G. Tuttle, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **74**, 195104 (2006).
- [253] Y.-C. Hsu and L.-W. Chen, *J. Opt.* **12**, 095709 (2010).
- [254] R. Sainidou, B. Djafari-Rouhani, and J. O. Vasseur, *Phys. Rev. B* **77**, 094304 (2008).
- [255] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, *Nature* **424**, 824 (2003).
- [256] E. R. Encina and E. A. Coronado, *J. Phys. Chem. C* **112**, 9586 (2008).
- [257] Y.-F. Chau, M. W. Chen, and D. P. Tsai, *Appl. Opt.* **48**, 617 (2009).

- [258] G. Gantzounis, *J. Phys. Chem. C* **113**, 21560 (2009).
- [259] K.-S. Lee and M. A. El-Sayed, *J. Phys. Chem. B* **109**, 20331 (2005).
- [260] E. S. Kooij and B. Poelsema, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 3349 (2006).
- [261] S. W. Prescott and P. Mulvaney, *J. Appl. Phys.* **99**, 123504 (2006).
- [262] B. N. Khlebtsov and N. G. Khlebtsov, *J. Phys. Chem. C* **111**, 11516 (2007).
- [263] W. Ni, X. Kou, Z. Yang, and J. Wang, *ACS Nano* **2**, 677 (2008).
- [264] P. K. Jain, S. Eustis, and M. A. El-Sayed, *J. Phys. Chem. B* **110**, 18243 (2006).
- [265] B. Willingham, D. W. Brandl, and P. Nordlander, *Appl. Phys. B* **93**, 209 (2008).
- [266] A. M. Funston, C. Novo, T. J. Davis, and P. Mulvaney, *Nano Lett.* **9**, 1651 (2009).
- [267] S.-D. Liu and M.-T. Cheng, *J. Appl. Phys.* **108**, 034313 (2010).
- [268] E. J. Smythe, E. Cubukcu, and F. Capasso, *Opt. Express* **15**, 7439 (2007).
- [269] P. R. Evans, R. Kulloock, W. R. Hendren, R. Atkinson, R. J. Pollard, and L. M. Eng, *Adv. Funct. Mater.* **18**, 1075 (2008).
- [270] C. Tserkezis, N. Papanikolaou, E. Almpanis, and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **80**, 125124 (2009).
- [271] R. Atkinson, W. R. Hendren, G. A. Wurtz, W. Dickson, A. V. Zayats, P. Evans, and R. J. Pollard, *Phys. Rev. B* **73**, 235402 (2006).
- [272] W. Dickson, G. A. Wurtz, P. Evans, D. O'Connor, R. Atkinson, R. Pollard, and A. V. Zayats, *Phys. Rev. B* **76**, 115411 (2007).
- [273] M. Fleischer, D. Zhang, K. Braun, S. Jäger, R. Ehlich, M. Häffner, C. Stanciu, J. K. H. Hörber, A. J. Meixner, and D. P. Kern, *Nanotechnology* **21**, 065301 (2010).
- [274] D. J. Lipomi, M. A. Kats, P. Kim, S. H. Kang, J. Aizenberg, F. Capasso, and G. M. Whitesides, *ACS Nano* **4**, 4017 (2010).
- [275] S. Habouti, M. Mátéfi-Tempfli, C.-H. Solterbeck, M. Es-Souni, S. Mátéfi-Tempfli, and M. Es-Souni, *J. Mater. Chem.* **21**, 6269 (2011).
- [276] Y. Liu, J. Fan, Y.-P. Zhao, S. Shanmukh, and R. A. Dluhy, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 173134 (2006).
- [277] A. V. Kabashin, P. Evans, S. Pastkovsky, W. Hendren, G. A. Wurtz, R. Atkinson, R. Pollard, V. A. Podolskiy, and A. V. Zayats, *Nature Mater.* **8**, 867 (2009).
- [278] G. A. Wurtz, W. Dickson, D. O'Connor, R. Atkinson, W. Hendren, P. Evans, R. Pollard, and A. V. Zayats, *Opt. Express* **16**, 7460 (2008).

- [279] D. P. Lyvers, J.-M. Moon, A. V. Kildishev, V. M. Shalaev, and A. Wei, *ACS Nano* **2**, 2569 (2008).
- [280] R. Kulloock, W. R. Hendren, A. Hille, S. Grafström, P. R. Evans, R. J. Pollard, R. Atkinson, and L. M. Eng, *Opt. Express* **16**, 21671 (2008).
- [281] J. Yao, Z. Liu, Y. Liu, Y. Wang, C. Sun, G. Bartal, A. M. Stacy, and X. Zhang, *Science* **321**, 930 (2008).
- [282] K. Imura, T. Nagahara, and H. Okamoto, *J. Chem. Phys.* **122**, 154701 (2005).
- [283] A. Brioude, X. C. Jiang, and M. P. Pileni, *J. Phys. Chem. B* **109**, 13138 (2005).
- [284] M. Liu, P. Guyot-Sionnest, T.-W. Lee, and S. K. Gray, *Phys. Rev. B* **76**, 235428 (2007).
- [285] L. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 266802 (2007).
- [286] X. Ben and H. S. Park, *J. Phys. Chem. C* **115**, 15915 (2011).
- [287] G. Gantzounis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B* **77**, 035101 (2008).
- [288] L. Dai and C. Jiang, *Appl. Phys. A* **95**, 105 (2009).
- [289] C. R. Simovski, A. J. Viitanen, and S. A. Tretyakov, *Phys. Rev. E* **72**, 066606 (2005).
- [290] A. S. Sánchez and P. Halevi, *Phys. Rev. E* **72**, 056609 (2005).
- [291] C. Creatore and L. C. Andreani, *Phys. Rev. A* **78**, 063825 (2008).
- [292] Y. C. Jun, R. M. Briggs, H. A. Atwater, and M. L. Brongersma, *Opt. Express* **17**, 7479 (2009).
- [293] C. Menzel, T. Paul, C. Rockstuhl, T. Pertsch, S. Tretyakov, and F. Lederer, *Phys. Rev. B* **81**, 035320 (2010).
- [294] R. Kulloock, S. Grafström, P. R. Evans, R. J. Pollard, and L. M. Eng, *J. Opt. Soc. Am. B* **27**, 1819 (2010).
- [295] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1212 (1999).
- [296] D. N. Chigrin, S. Enoch, C. M. Sotomayor Torres, and G. Tayeb, *Opt. Express* **11**, 1203 (2003).
- [297] R. Iliew, C. Etrich, and F. Lederer, *Opt. Express* **13**, 7076 (2005).
- [298] J. Shi, B. K. Juluri, S.-C. S. Lin, M. Lu, T. Gao, and T. J. Huang, *J. Appl. Phys.* **108**, 043514 (2010).

- [299] D. W. Prather, S. Shi, J. Murakowski, G. J. Schneider, A. Sharkawy, C. Chen, B. L. Miao, and R. Martin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 2635 (2007).
- [300] M. Quinten, A. Leitner, J. R. Krenn, and F. R. Aussenegg, *Opt. Lett.* **23**, 1331 (1998).
- [301] J. R. Krenn, A. Dereux, J. C. Weeber, E. Bourillot, Y. Lacroute, J. P. Goudonnet, G. Schider, W. Gotschy, A. Leitner, F. R. Aussenegg, and C. Girard, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2590 (1999).
- [302] S. A. Maier, M. L. Brongersma, P. G. Kik, and H. A. Atwater, *Phys. Rev. B* **65**, 193408 (2002).
- [303] S. A. Maier, P. G. Kik, H. A. Atwater, S. Meltzer, E. Harel, B. E. Koel, and A. A. G. Requicha, *Nature Mater.* **2**, 229 (2003).
- [304] A. F. Koenderink, *Nano Lett.* **9**, 4228 (2009).
- [305] S. A. Maier, M. L. Brongersma, P. G. Kik, S. Meltzer, A. A. G. Requicha, and H. A. Atwater, *Adv. Mater.* **13**, 1501 (2001).
- [306] F. M. Wang, H. Liu, T. Li, S. M. Wang, S. N. Zhu, J. Zhu, and W. Cao, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 133107 (2007).
- [307] A. Alù, P. A. Belov, and N. Engheta, *New J. Phys.* **13**, 033026 (2011).
- [308] M. Guasoni and M. Conforti, *J. Opt. Soc. Am. B* **28**, 1019 (2011).
- [309] I. B. Udagedara, I. D. Rukhlenko, and M. Premaratne, *Opt. Express* **19**, 19973 (2011).
- [310] M. Conforti and M. Guasoni, *J. Opt. Soc. Am. B* **27**, 1576 (2010).
- [311] S. K. Gray and T. Kupka, *Phys. Rev. B* **68**, 045415 (2003).
- [312] K. H. Fung and C. T. Chan, *Opt. Lett.* **32**, 973 (2007).
- [313] K. H. Fung and C. T. Chan, *Opt. Commun.* **281**, 855 (2008).
- [314] Y. Hadad and B. Z. Steinberg, *Phys. Rev. B* **84**, 125402 (2011).
- [315] S. Campione, S. Steshenko, and F. Capolino, *Opt. Express* **19**, 18345 (2011).
- [316] M. L. Brongersma, J. W. Hartman, and H. A. Atwater, *Phys. Rev. B* **62**, R16356 (2000).
- [317] S. Y. Park and D. Stroud, *Phys. Rev. B* **69**, 125418 (2004).
- [318] D. S. Citrin, *Nano Lett.* **4**, 1561 (2004).
- [319] W. H. Weber and G. W. Ford, *Phys. Rev. B* **70**, 125429 (2004).

- [320] A. F. Koenderink and A. Polman, *Phys. Rev. B* **74**, 033402 (2006).
- [321] A. Alù and N. Engheta, *Phys. Rev. B* **74**, 205436 (2006).
- [322] A. F. Koenderink, R. de Waele, J. C. Prangma, and A. Polman, *Phys. Rev. B* **76**, 201403(R) (2007).
- [323] A. Alù and N. Engheta, *Phys. Rev. B* **79**, 235412 (2009).
- [324] I. B. Udagedara, I. D. Rukhlenko, and M. Premaratne, *Phys. Rev. B* **83**, 115451 (2011).
- [325] D. S. Citrin, *Opt. Lett.* **31**, 98 (2006).
- [326] L. Lewin, *Polylogarithms and Associated Functions* (Elsevier, 1981).
- [327] T. Yang and K. B. Crozier, *Opt. Express* **16**, 8570 (2008).
- [328] K. H. Fung, R. C. H. Tang, and C. T. Chan, *Opt. Lett.* **36**, 2206 (2011).
- [329] R. Quidant, C. Girard, J.-C. Weeber, and A. Dereux, *Phys. Rev. B* **69**, 085407 (2004).
- [330] S. A. Maier, P. G. Kik, and H. A. Atwater, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1714 (2002).
- [331] S. M. Wang, T. Li, H. Liu, F. M. Wang, S. N. Zhu, and X. Zhang, *Opt. Express* **16**, 3560 (2008).
- [332] Y. Ekinici, A. Christ, M. Agio, O. J. F. Martin, H. H. Solak, and J. F. Löffler, *Opt. Express* **16**, 13287 (2008).
- [333] C. J. Tang, P. Zhan, Z. S. Cao, J. Pan, Z. Chen, and Z. L. Wang, *Phys. Rev. B* **83**, 041402(R) (2011).
- [334] Q. Li, W. Lin, and G. P. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 041109 (2011).
- [335] N. Feth, C. Enkrich, M. Wegener, and S. Linden, *Opt. Express* **15**, 501 (2006).
- [336] Q. Li and G. P. Wang, *Opt. Express* **18**, 14123 (2010).
- [337] A. N. Grigorenko, A. K. Geim, H. F. Gleeson, Y. Zhang, A. A. Firsov, I. Y. Khrushchev, and J. Petrovic, *Nature* **438**, 335 (2005).
- [338] A. K. Sarychev, G. Shvets, and V. M. Shalaev, *Phys. Rev. E* **73**, 036609 (2006).
- [339] F. J. García de Abajo, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1267 (2007).
- [340] M. Englund and A. Viitanen, *Microw. Opt. Technol. Lett.* **49**, 2419 (2007).
- [341] W. A. Harrison, *Solid State Theory* (Dover, 1980).
- [342] V. Heine, *Proc. Phys. Soc. London* **81**, 300 (1963).
- [343] P. Halevi, *Phys. Rev. B* **51**, 7497 (1995).

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο - ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ)
Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: «Ηράκλειτος II. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου».

