



ΕΘΝΙΚΟΝ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΝ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

Η Μέθοδος Στρωματικής Πολλαπλής Σκέδασης για
Φωτονικούς Κρυστάλλους

Κούρκουλου Αικατερίνη - Μαρία

ΑΜ: 1110201600082

Πτυχιακή εργασία

Επιβλέπων καθηγητής: Ν. Στεφάνου

Αθήνα - Ιανουάριος 2021

Περίληψη

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι είναι σύνθετα υλικά που χαρακτηρίζονται από μια περιοδική στο χώρο διηλεκτρική συνάρτηση. Η περιοδικότητα αυτή οδηγεί στην εμφάνιση περιοχών συχνότητων για τις οποίες η διάδοση φωτός δια μέσου του κρυστάλλου είναι αδύνατη. Η ύπαρξη αυτών των λεγόμενων φωτονικών χασμάτων, όπως και η ιδιαίτερη αλληλεπίδραση των φωτονικών κρυστάλλων με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, προσφέρουν πολλές εφαρμογές για τον έλεγχο της διάδοσης του φωτός και για την ενίσχυση της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας-ύλης. Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται αναλυτικά η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης για τη μελέτη των φωτονικών κρυστάλλων, η οποία στη συνέχεια εφαρμόζεται για τον προσδιορισμό του φάσματος διέλευσης πεπερασμένων πολυστρωματικών πλακιδίων αποτελούμενων από διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρικών σχεδαστών και της φωτονικής μιγαδικής δομής ζωνών των αντίστοιχων άπειρων κρυστάλλων. Από τα αποτελέσματα εξάγονται βασικές παρατηρήσεις για την οπτική απόκριση αυτών των δομών, όπως η συμπεριφορά ενεργού μέσου στο όριο μεγάλου μήκους κύματος και οι χαρακτηριστικές κορυφές του συντελεστή ανάκλασης στις συχνότητες του χάσματος, ενώ διερευνάται η επίδραση του αριθμού επιπέδων και της διαφοράς των διηλεκτρικών σταθερών των υλικών της δομής στη μορφή του φάσματος διέλευσης και της μιγαδικής δομής ζωνών.

Abstract

Photonic crystals are composite materials characterized by a dielectric function which varies periodically in space. This periodicity leads to the appearance of frequency regions over which no propagation of light is possible. The existence of these so-called photonic gaps, as well as the distinctive interaction of photonic crystals and electromagnetic radiation, offer a variety of applications in controlling light propagation and enhancing light-matter interaction. This dissertation develops the layer multiple scattering method for the study of photonic crystals, which is then applied for the calculation of the transmission spectrum of finite multilayered slabs consisting of successive fcc (111) planes of spherical scatterers and the photonic band structure of the respective infinite crystals. Based on the results, fundamental observations are derived concerning the optical response of such structures, like a behavior similar to that of a homogeneous effective medium in the long wavelength limit and the distinctive reflectance peaks for frequencies contained in the photonic gap, while the effect of the number of layers and the dielectric function contrast of the constituent materials on the transmission spectrum and the frequency bands is also discussed.

Περιεχόμενα

Εισαγωγή	i
1 Στοιχεία ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας	1
1.1 Οι Εξισώσεις Maxwell στην ύλη	1
1.2 Επίπεδα κύματα	2
1.3 Θεώρημα Poynting	3
1.4 Συνοριακές συνθήκες και σχέσεις Fresnel	4
1.5 Λύση της κυματικής εξίσωσης σε μορφή σφαιρικών κυμάτων	7
1.6 Πολυπολικό ανάπτυγμα του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου	10
2 Μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης	13
2.1 Σκέδαση από μεμονωμένο σφαιρικό σωματίδιο	13
2.2 Θεωρία πολλαπλής σκέδασης	15
2.3 Σκέδαση από δισδιάστατη περιοδική δομή	18
2.4 Σκέδαση από ομοιογενές πλακίδιο	24
2.5 Σκέδαση από σύνθετο πλακίδιο	27
2.6 Φωτονική μιγαδική δομή ζωνών απείρου κρυστάλλου	29
3 Εφαρμογή για διαδοχικά επίπεδα fcc (111)	33
3.1 Σύντομη περιγραφή του λογισμικού MULTEM	33
3.2 Αποτελέσματα για διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σκεδαστών πολυστυρενίου	34
3.3 Επίδραση της αντίθεσης των διηλεκτρικών σταθερών	41
3.4 Εφαρμογές φωτονικών κρυστάλλων	43
A' Σφαιρικές συναρτήσεις Bessel	45
B' Σφαιρικές αρμονικές	47
Γ' Απόδειξη της Εξ. (1.65)	51
Δ' Ανάπτυγμα επίπεδων κυμάτων σε σφαιρικές αρμονικές	55
E' Αναλυτικός υπολογισμός των $A_{\ell m}^0(\hat{q})$ και $A_{H\ell m}^0(\hat{q})$	59
Φ' Εύρεση του πίνακα σκέδασης μεμονωμένου σφαιρικού σωματιδίου	63
Z' Απόδειξη των Εξ. (2.23), (2.24) και (2.25)	67
H' Απόδειξη των Εξ. (2.27)-(2.30)	71
Θ' Προσδιορισμός των $\Delta_{\ell m}(\mathbf{K}_g^s)$ και $\Delta_{H\ell m}(\mathbf{K}_g^s)$	75
Βιβλιογραφία	77

Εισαγωγή

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι είναι σύνθετα υλικά που χαρακτηρίζονται από την περιοδική μεταβολή της διηλεκτρικής σταθεράς τους. Η διάδοση του φωτός δια μέσου τέτοιων δομών διαφοροποιείται από αυτήν στην περίπτωση των ομοιογενών μέσων εξ αιτίας των σχεδιάσεων από τα επίπεδα που δομούν τον κρύσταλλο. Οι καταστρεπτικές συμβολές των κυμάτων, κατά αναλογία με την περίπτωση των καταστάσεων ηλεκτρονίων σε περιοδικό κρυσταλλικό δυναμικό, οδηγούν στην εμφάνιση απαγορευμένων περιοχών συχνότητας, γνωστών ως φωτονικά χάσματα, για τις οποίες δεν είναι δυνατή η διάδοση της ακτινοβολίας δια μέσω του κρυστάλλου. Η παρουσία αυτών των χασμάτων, όπως και η ιδιαίτερη αλληλεπίδραση των φωτονικών κρυστάλλων με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, συγκεντρώνουν διαρκώς αυξανόμενο ερευνητικό ενδιαφέρον, τόσο από άποψη θεμελιώδους φυσικής όσο και εφαρμογών για τον έλεγχο της διάδοσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε διάφορα μήκη κύματος.

Πλακίδια που αποτελούνται από διαδοχικά ομοιογενή επίπεδα ή από διαδοχικά επίπεδα περιοδικών διατάξεων σφαιρικών σωματιδίων σε ομοιογενές περιβάλλον είναι μερικά παραδείγματα φωτονικών κρυστάλλων. Η μελέτη της οπτικής απόκρισης τέτοιων δομών μπορεί να επιτευχθεί με αριθμητικές μεθόδους που βασίζονται στη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης. Μέσω αυτής μπορούν να προσδιοριστούν τόσο οι συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης όσο και η μιγαδική δομή ζωνών που διαμορφώνεται στην περίπτωση του άπειρου κρυστάλλου.

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται εκτενώς η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης για τη μελέτη των φωτονικών κρυστάλλων. Εξετάζεται η πολλαπλή σκέδαση από δισδιάστατη περιοδική δομή και από ομοιογενές πλακίδιο, ενώ στη συνέχεια μελετάται η σκέδαση από σύνθετα πλακίδια αποτελούμενα από διαδοχικές τέτοιες δομές. Η μέθοδος ακολουθώς εφαρμόζεται για τον προσδιορισμό του φάσματος διέλευσης πεπερασμένων πολυστρωματικών πλακιδίων αποτελούμενων από διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρικών σχεδαστών και της φωτονικής μιγαδικής δομής ζωνών των αντίστοιχων άπειρων κρυστάλλων. Από τα αποτελέσματα εξάγονται βασικές παρατηρήσεις για την οπτική απόκριση αυτών των δομών, όπως η συμπεριφορά ενεργού μέσου στο όριο μεγάλου μήκους κύματος και οι χαρακτηριστικές κορυφές του συντελεστή ανάκλασης στις συχνότητες του χάσματος, ενώ διερευνάται η επίδραση του αριθμού επιπέδων και της διαφοράς των διηλεκτρικών σταθερών των υλικών της δομής στη μορφή του φάσματος διέλευσης και της μιγαδικής δομής ζωνών. Στην Ενότητα 1 συνοψίζονται τα στοιχεία της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας στα οποία βασίζεται η ανάπτυξη της θεωρίας στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, που αναλύεται στην Ενότητα 2. Τέλος, στην Ενότητα 3 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής της μεθόδου και οι σχετικές παρατηρήσεις, ενώ γίνεται σύντομη αναφορά στις διαφορετικές τεχνολογικές εφαρμογές για τις οποίες προσφέρονται οι φωτονικοί κρύσταλλοι.

1 Στοιχεία ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας

1.1 Οι Εξισώσεις Maxwell στην ύλη

Το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο στην ύλη, στο σύστημα μονάδων SI, περιγράφεται από τις εξισώσεις Maxwell¹:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1.4)$$

όπου \mathbf{D} η ηλεκτρική μετατόπιση, ρ η πυκνότητα ελεύθερου φορτίου, \mathbf{B} η μαγνητική επαγωγή, \mathbf{E} και \mathbf{H} το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο και \mathbf{j} η πυκνότητα ελεύθερου ρεύματος.

Εν γένει η συσχέτιση των \mathbf{D} και \mathbf{H} από τα \mathbf{E} και \mathbf{B} μπορεί να είναι πολύπλοκη και να εξαρτάται από την προηγούμενη ιστορία του υλικού. Στις περιπτώσεις που θα μας απασχολήσουν οι εξαρτήσεις αυτές παίρνουν τη μορφή:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.5)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} \quad (1.6)$$

όπου \mathbf{P} και \mathbf{M} η ηλεκτρική και η μαγνητική πόλωση του υλικού, αντίστοιχα, και ϵ_0, μ_0 η διηλεκτρική σταθερά και η μαγνητική διαπερατότητα του κενού. Ιδιαίτερα για γραμμικά και ιστροπικά μέσα έχουμε: $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}$, όπου η σταθερά αναλογίας χ_e ονομάζεται ηλεκτρική επιδεκτικότητα, και $\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}$, όπου η σταθερά αναλογίας χ_m ονομάζεται μαγνητική επιδεκτικότητα. Επομένως, οι Εξ. (1.5) και (1.6) μπορούν να γραφούν ως:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0(1 + \chi_e) \mathbf{E} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E} \quad (1.7)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(1 + \chi_m) \mathbf{H} = \mu_0 \mu \mathbf{H} \quad (1.8)$$

Τα ϵ και μ είναι η σχετική διηλεκτρική σταθερά και η σχετική μαγνητική διαπερατότητα του υλικού, αντίστοιχα. Στην περίπτωση του γραμμικού ιστροπικού μέσου, συνεπώς, οι εξισώσεις Maxwell μπορούν να γραφούν ως:

$$\nabla \cdot [\epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (1.9)$$

$$\nabla \cdot [\mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)] = 0 \quad (1.10)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (1.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (1.12)$$

Τέλος, αν ο χώρος δεν έχει φορτία και ρεύματα, η μορφή των εξισώσεων αυτών μπορεί να

απλοποιηθεί περαιτέρω:

$$\nabla \cdot [\epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0 \quad (1.13)$$

$$\nabla \cdot [\mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)] = 0 \quad (1.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (1.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (1.16)$$

1.2 Επίπεδα κύματα

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα: $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ και δρώντας με $\nabla \times$ στην Εξ. (1.11), με χρήση των Εξ. (1.9) και (1.12), παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -\mu_0 \mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{H}) \Rightarrow \\ \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} &= -\mu_0 \mu \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j} \right) \Rightarrow \\ \nabla \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon} - \nabla^2 \mathbf{E} &= -\mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \Rightarrow \\ \nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \left(\nabla \rho + \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (1.17)$$

Αντίστοιχα για την Εξ. (1.12), με χρήση των Εξ. (1.10) και (1.11):

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) &= \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{E}) + \nabla \times \mathbf{j} \Rightarrow \\ \nabla (\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H} &= -\frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{j} \Rightarrow \\ \nabla^2 \mathbf{H} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} &= -\nabla \times \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.18)$$

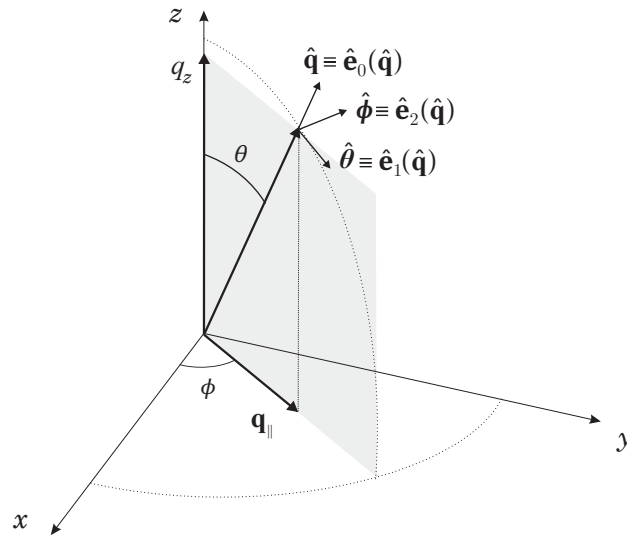
όπου: $c = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}}$ η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Στην περίπτωση που βρισκόμαστε σε χώρο χωρίς ρεύματα και πυκνότητες φορτίου οι Εξ. (1.17) και (1.18) παίρνουν τη μορφή:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.19)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.20)$$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι κυματικές εξισώσεις και επιδέχονται μονοχρωματικές αρμονικές λύσεις: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$ και $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$, αντίστοιχα. Λόγω της γραμμικότητας των εξισώσεων Maxwell κάθε πεδίο μπορεί να προκύψει από το γραμμικό συνδυασμό των μονοχρωματικών πεδίων με βάση την αρχή της επαλληλίας. Επαρκεί, επομένως, η λύση του προβλήματος μόνο για μονοχρωματικά πεδία της παραπάνω μορφής.



Σχήμα 1: Τοπικό σύστημα συντεταγμένων ως προς το κυματόνισμα \mathbf{q} και ανάλυση του σε συνιστώσες.

Λόγω της μορφής των αρμονικών λύσεων οι κυματικές εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + q^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.21)$$

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

με $q = \omega \frac{\sqrt{\epsilon\mu}}{c}$. Πλήρες σύνολο λύσεων αυτών των κυματικών εξισώσεων αποτελούν τα επίπεδα κύματα με κυματόνισμα \mathbf{q} :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.23)$$

με $\mathbf{E}_0(\mathbf{q}) = E_0(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{e}}_p$, όπου τα διανύσματα $\hat{\mathbf{e}}_p$ για $p = 0, 1, 2$ συμβολίζουν το ακτινικό, το πολικό και το αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα για το δεδομένο κυματόνισμα, \mathbf{q} , και καθορίζουν την πόλωση του ηλεκτρικού πεδίου (Σχ. 1). Για το αντίστοιχο μαγνητικό πεδίο από την Εξ. (1.11), έχουμε:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Rightarrow \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= i\omega \mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\omega \mu_0 \mu} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.24)$$

όπου το $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ δίνεται από την Εξ. (1.23).

1.3 Θεώρημα Poynting

Από την αρχή διατήρησης της ενέργειας γνωρίζουμε ότι το άθροισμα του ρυθμού μεταβολής της ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας σε δεδομένο όγκο και του ρυθμού ροής ενέργειας από

την επιφάνεια που περικλείει αυτόν τον όγκο πρέπει να ισούται με το έργο του πεδίου μέσα σε αυτόν τον όγκο. Για μια κατανομή φορτίων και ρευμάτων η ισχύς που προσδίδεται σε αυτήν ανά μονάδα όγκου ισούται με το γινόμενο: $\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}$. Αντικαθιστώντας την Εξ. (1.4) και χρησιμοποιώντας την ταυτότητα: $\nabla (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$, με χρήση της Εξ. (1.3), για γραμμικά μέσα προκύπτει:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} &= \mathbf{E} \cdot \left[\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right] \Rightarrow \\ \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} &= \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) - \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \Rightarrow \\ -\mathbf{E} \cdot \mathbf{j} &= \left(\mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \Rightarrow \\ -\mathbf{E} \cdot \mathbf{j} &= \frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (1.25)$$

όπου $U \equiv \frac{1}{2} [\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}]$ η πυκνότητα ενέργειας του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου ανά μονάδα όγκου και $\mathbf{S} \equiv \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ το διάνυσμα Poynting. Το \mathbf{S} παριστά την ενέργεια ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα εμβαδού που μεταφέρεται από τα πεδία, δηλαδή τη ροή ενέργειας, κατά τη διεύθυνσή του. Κατά συνέπεια το $\nabla \cdot \mathbf{S}$ εκφράζει την ηλεκτρομαγνητική ισχύ που εκρέει από τη μονάδα όγκου. Η Εξ. (1.25) είναι γνωστή ως εξίσωση διατήρησης της ενέργειας ή θεωρήμα Poynting. Η μέση ροή ενέργειας ενός μονοχρωματικού αρμονικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος δίνεται από τη μέση χρονική τιμή του διανύσματος Poynting σε μια περίοδο, δηλαδή από τη σχέση:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} [\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})] \quad (1.26)$$

1.4 Συνοριακές συνθήκες και σχέσεις Fresnel

Έστω μια διεπιφάνεια μεταξύ δύο ομοιογενών, ισότροπων και ημιάπειρων μέσων (1), με ϵ_1, μ_1 και (2), με ϵ_2, μ_2 , χωρίς ελεύθερα φορτία και ρεύματα και $\hat{\mathbf{n}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο σε αυτήν. Ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις Maxwell (1.1)-(1.4) με χρήση των θεωρημάτων Gauss, $\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \oint_{\partial V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a}$, και Stokes, $\int_S (\nabla \times \mathbf{F}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_{\partial S} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}$, προκύπτουν οι συνοριακές συνθήκες:

$$(\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}}|_S = 0 \quad (1.27)$$

$$(\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}}|_S = 0 \quad (1.28)$$

$$(\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) \times \hat{\mathbf{n}}|_S = 0 \quad (1.29)$$

$$(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \times \hat{\mathbf{n}}|_S = 0 \quad (1.30)$$

Θεωρώντας ότι η διεπιφάνεια βρίσκεται πάνω στο επίπεδο $x-y$, στο σημείο $z = 0$, το μοναδιαίο διάνυσμα $\hat{\mathbf{n}}$ ταυτίζεται με το $\hat{\mathbf{z}}$.

Έστω ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει πάνω στη διεπιφάνεια από το μέσο (1) στο μέσο (2). Το ηλεκτρικό πεδίο και το μαγνητικό πεδίο τότε ικανοποιούν τις Εξ. (1.21), με $q^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0 \epsilon \mu$, και (1.24), αντίστοιχα. Η φασική ταχύτητα του κύματος τότε είναι $v_p = \omega/q = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0 \epsilon \mu} \equiv$

c/n , όπου n ο δείκτης διάθλασης, $n = \sqrt{\epsilon\mu}$. Στη διεπιφάνεια των δύο μέσων επομένως έχουμε τα πεδία:

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_{10}e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}} \quad \mathbf{H}_1 = \frac{1}{\omega\mu_0\mu_1}\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1 \quad (1.31)$$

$$\mathbf{E}'_1 = \mathbf{E}'_{10}e^{i\mathbf{q}'_1 \cdot \mathbf{r}} \quad \mathbf{H}'_1 = \frac{1}{\omega\mu_0\mu_1}\mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1 \quad (1.32)$$

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_{20}e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}} \quad \mathbf{H}_2 = \frac{1}{\omega\mu_0\mu_2}\mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2 \quad (1.33)$$

όπου το \mathbf{E}_1 είναι το προσπίπτον, \mathbf{E}'_1 το ανακλώμενο και \mathbf{E}_2 το διερχόμενο στο υλικό (2) κύμα, ενώ τα \mathbf{E}_{j0} είναι τα πλάτη των πεδίων στο μέσο (j). Τα πεδία αυτά πρέπει να έχουν την ίδια χωρική και χρονική συμπεριφορά στη θέση της διαχωριστικής επιφάνειας, $z = 0$. Συνεπώς:

$$\begin{aligned} (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} &= (\mathbf{q}'_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r})_{z=0} \Rightarrow \\ q_1 \sin \theta_i &= q'_1 \sin \theta_r = q_2 \sin \theta_t \end{aligned} \quad (1.34)$$

όπου θ_i η γωνία πρόσπτωσης, θ_r η γωνία ανάκλασης και θ_t η γωνία διάθλασης. Οι κυματαριθμοί \mathbf{q}_1 και \mathbf{q}'_1 αναφέρονται στο ίδιο μέσο, επομένως έχουν ίσα μέτρα: $q_1 = q'_1$. Άρα τελικά παίρνουμε:

$$\theta_i = \theta_r \quad (1.35)$$

$$q_1 \sin \theta_i = q_2 \sin \theta_t \quad \text{ή} \quad n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t \quad (1.36)$$

Η Εξ. (1.36) είναι ο νόμος του Snell. Επιπλέον η παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος διατηρείται. Έχουμε θεωρήσει ότι η διηλεκτρική συνάρτηση και η μαγνητική διαπερατότητα είναι πραγματικές. Στη γενική περίπτωση όμως είναι μιγαδικές ποσότητες: $\epsilon = \text{Re}[\epsilon] + i\text{Im}[\epsilon]$ και $\mu = \text{Re}[\mu] + i\text{Im}[\mu]$, με τα φανταστικά μέρη να περιγράφουν τις ενεργειακές απώλειες.

Οι συνοριακές συνθήκες (1.27)-(1.30) μέσω των Εξ. (1.7) και (1.8) για το συγκεκριμένο πρόβλημα γράφονται:

$$[\epsilon_1 \mathbf{E}_1 + \epsilon_1 \mathbf{E}'_1 - \epsilon_2 \mathbf{E}_2] \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0 \quad (1.37)$$

$$[\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1 + \mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1 - \mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2] \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0 \quad (1.38)$$

$$[\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}'_1 - \mathbf{E}_2] \times \hat{\mathbf{z}} = 0 \quad (1.39)$$

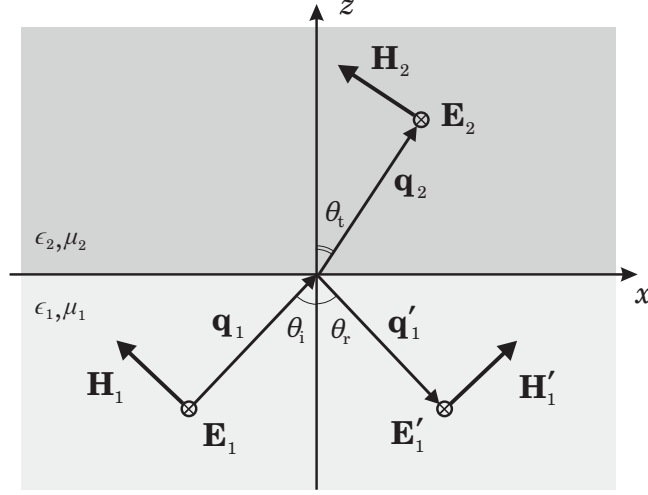
$$\left[\frac{1}{\mu_1}(\mathbf{q}_1 \times \mathbf{E}_1) + \frac{1}{\mu_1}(\mathbf{q}'_1 \times \mathbf{E}'_1) - \frac{1}{\mu_2}(\mathbf{q}_2 \times \mathbf{E}_2) \right] \times \hat{\mathbf{z}} = 0 \quad (1.40)$$

Τα διανύσματα \mathbf{q} και $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{z}}$ ορίζουν το επίπεδο πρόσπτωσης. Μπορούμε να ξεχωρίσουμε δύο περιπτώσεις που αντιστοιχούν στις δύο βασικές πολώσεις, την εγκάρσια ηλεκτρική (TE), όπου το ηλεκτρικό πεδίο είναι πολωμένο κάθετα στο επίπεδο πρόσπτωσης, και την εγκάρσια μαγνητική (TM), όπου το μαγνητικό πεδίο είναι πολωμένο κάθετα στο επίπεδο πρόσπτωσης.

Στην περίπτωση της πόλωσης TE, θεωρώντας το σύστημα συντεταγμένων έτσι ώστε τα ηλεκτρικά πεδία να είναι παράλληλα στον άξονα y , δηλαδή $\mathbf{E}_j = (0, E_j, 0)$, έχουμε ότι οι συνιστώσες των κυματανυσμάτων θα είναι: $\mathbf{q}_j = (q_j \sin \theta_j, 0, q_j \cos \theta_j)$ (Σχ. 2). Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες προκύπτουν οι σχέσεις:

$$E_1 + E'_1 = E_2 \quad (1.41)$$

$$\frac{q_1}{\mu_1} E_1 \cos \theta_i - \frac{q_1}{\mu_1} E'_1 \cos \theta_i = \frac{q_2}{\mu_2} E_2 \cos \theta_t \quad (1.42)$$



Σχήμα 2: Ανάκλαση και διάθλαση στη διεπιφάνεια δύο ομοιογενών μέσων για προσπίπτον κύμα πόλωσης TE.

Λύνοντας το σύστημα παίρνουμε:

$$E_1 \left[\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i - \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t \right] = E'_1 \left[\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t \right] \quad (1.43)$$

$$2E_1 \frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i = E_2 \left[\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t \right] \quad (1.44)$$

Μέσω αυτών των σχέσεων ορίζεται ο συντελεστής ανάκλασης:

$$r_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E'_1}{E_1} = \frac{\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i - \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t}{\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t} = \frac{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} - \mu_1 q_{2(\text{TE})z}}{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}} \quad (1.45)$$

και ο συντελεστής διέλευσης:

$$t_{12(\text{TE})} \equiv \frac{E_2}{E_1} = \frac{2 \frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i}{\frac{q_1}{\mu_1} \cos \theta_i + \frac{q_2}{\mu_2} \cos \theta_t} = \frac{2 \mu_2 q_{1(\text{TE})z}}{\mu_2 q_{1(\text{TE})z} + \mu_1 q_{2(\text{TE})z}} = 1 + r_{12(\text{TE})} \quad (1.46)$$

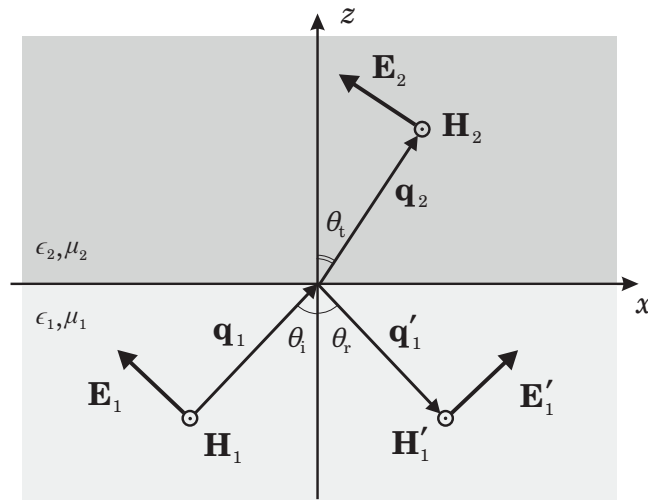
Αντίστοιχα στην περίπτωση της πόλωσης TM, θεωρώντας το σύστημα συντεταγμένων έτσι ώστε τα μαγνητικά πεδία να είναι παράλληλα στον άξονα y , δηλαδή $\mathbf{H}_j = (0, H_j, 0)$, έχουμε ότι οι συνιστώσες των κυματανυσμάτων θα είναι: $\mathbf{q}_j = (q_j \sin \theta_j, 0, q_j \cos \theta_j)$ (Σχ. 3). Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες προκύπτουν οι σχέσεις:

$$H_1 + H'_1 = H_2 \Rightarrow \frac{q_1}{\mu_1} E_1 + \frac{q_1}{\mu_1} E'_1 = \frac{q_2}{\mu_2} E_2 \quad (1.47)$$

$$E_1 \cos \theta_i - E'_1 \cos \theta_i = E_2 \cos \theta_t \quad (1.48)$$

Λύνοντας το σύστημα τελικά παίρνουμε:

$$r_{12(\text{TM})} \equiv \frac{E'_1}{E_1} = \frac{q_2 \mu_1 \cos \theta_i - q_1 \mu_2 \cos \theta_t}{q_2 \mu_1 \cos \theta_i + q_1 \mu_2 \cos \theta_t} = \frac{\epsilon_2 q_{1(\text{TM})z} - \epsilon_1 q_{2(\text{TM})z}}{\epsilon_2 q_{1(\text{TM})z} + \epsilon_1 q_{2(\text{TM})z}} \quad (1.49)$$



Σχήμα 3: Ανάκλαση και διάθλαση στη διεπιφάνεια δύο ομοιογενών μέσων για προσπίπτον κύμα πόλωσης TM.

και

$$t_{12(\text{TM})} \equiv \frac{E_2}{E_1} = \frac{2q_1\mu_2 \cos \theta_i}{q_1\mu_2 \cos \theta_t + q_2\mu_1 \cos \theta_i} = 2 \frac{\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \sqrt{\epsilon_2\mu_2} q_{1(\text{TM})z}}{\epsilon_2 q_{1(\text{TM})z} + \epsilon_1 q_{2(\text{TM})z}} \quad (1.50)$$

Όταν η πρόσπτωση είναι κάθετη, δηλαδή $\theta_i = \theta_r = \theta_t = 0$, οι συντελεστές ανάκλασης και διάθλασης είναι ίδιοι και για τις δύο πολώσεις, εκτός από το διαφορετικό πρόσημο στον συντελεστή ανάκλασης, το οποίο υποδηλώνει ότι στην περίπτωση της TM πόλωσης οι παράλληλες στη διεπιφάνεια συνιστώσες του \mathbf{E}_1 και του \mathbf{E}'_1 έχουν αντίθετες φορές.

Στην περίπτωση ενός πεπερασμένου ομοιογενούς και ισότροπου πλακιδίου, πάχους h , με ϵ_2, μ_2 , τοποθετημένου μεταξύ δύο διαφορετικών μέσων με ϵ_1, μ_1 και ϵ_3, μ_3 , αντίστοιχα, για τον υπολογισμό των συντελεστών ανάκλασης και διάθλασης πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν όλες οι πολλαπλές ανακλάσεις. Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες στις δύο επιφάνειες, από τις γεωμετρικές σειρές που προκύπτουν τελικά βρίσκουμε τους συντελεστές:

$$r = \frac{r_{12} + r_{23}e^{i2q_2z}h}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2q_2z}h} \quad (1.51)$$

$$t = \frac{t_{12}t_{23}e^{iq_2z}h}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2q_2z}h} \quad (1.52)$$

Οι σχέσεις αυτές ονομάζονται εξισώσεις Fresnel και τα r_{12}, r_{23}, t_{12} και t_{23} δίνονται από τις Εξ. (1.45), (1.49), (1.46), και (1.50), ανάλογα με την πόλωση.

1.5 Λύση της κυματικής εξίσωσης σε μορφή σφαιρικών κυμάτων

Σε ομοιογενές ισότροπικό μέσο σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς ϵ και σχετικής μαγνητικής διαπερατότητας μ , χωρίς πηγές, από τις εξισώσεις Maxwell (1.13) και (1.14) προκύπτει ότι:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \Rightarrow \text{iq} \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.53)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \Rightarrow \text{iq} \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.54)$$

Δηλαδή το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στη διεύθυνση διάδοσης. Επιπλέον από τις Εξ. (1.19) και (1.20) έχουμε ότι:

$$\nabla^2 \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.55)$$

όπου $\mathbf{F} = \mathbf{E}, \mathbf{H}$. Δηλαδή τα πεδία ικανοποιούν την κυματική εξίσωση.

Αντίστοιχα με προηγούμενως, θεωρώντας μονοχρωματικές λύσεις της μορφής: $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{F}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$ καταλήγουμε στην εξίσωση Helmholtz για τα δύο διανυσματικά πεδία:

$$\nabla^2 \mathbf{F}(\mathbf{r}) + q^2 \mathbf{F}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.56)$$

όπου $q = \omega \frac{\sqrt{\epsilon\mu}}{c}$ ο αντίστοιχος κυματαριθμός.

Με χρήση της ταυτότητας: $\nabla^2 (\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}) = \mathbf{r} \cdot \nabla^2 \mathbf{F} + 2\nabla \cdot \mathbf{F}$, και αφού η απόκλιση των πεδίων είναι μηδέν, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο του \mathbf{r} με την Εξ. (1.56) προκύπτει ότι το βαθμωτό $\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}$ ικανοποιεί και αυτό την εξίσωση Helmholtz:

$$\nabla^2 [\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r})] + q^2 [\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r})] = 0 \quad (1.57)$$

Παράλληλα αφού τα πεδία είναι σωληνοειδή ($\nabla \cdot \mathbf{F} = 0$) μπορούμε να γραφούν με χρήση ενός διανυσματικού δυναμικού \mathbf{G} ως: $\mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{G}$. Επομένως, προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathbf{F} &= \mathbf{r} \cdot (\nabla \times \mathbf{G}) \Rightarrow \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{F} &= i [-i (\mathbf{r} \times \nabla)] \cdot \mathbf{G} \Rightarrow \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{F} &= i \mathbf{L} \cdot \mathbf{G} \end{aligned} \quad (1.58)$$

όπου $\mathbf{L} = -i (\mathbf{r} \times \nabla)$ είναι ο τελεστής τροχιακής στροφορμής. Συνεπώς, η Εξ. (1.57) παίρνει τη μορφή:

$$\nabla^2 [\mathbf{L} \cdot \mathbf{G}] + q^2 [\mathbf{L} \cdot \mathbf{G}] = 0 \quad (1.59)$$

Η λύση της εξίσωσης Helmholtz για βαθμωτά πεδία σε σφαιρικές συντεταγμένες έχει τη μορφή:

$$\Phi_{\ell m} = f_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.60)$$

Οι συναρτήσεις $f_{\ell}(x)$ είναι οι συναρτήσεις Bessel (Παράρτημα Α') και οι $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές, οι οποίες είναι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή \mathbf{L}^2 με ιδιοτιμές $\ell(\ell+1)$ (Παράρτημα Β'). Με το όρισμα $\hat{\mathbf{r}}$ δηλώνονται οι γωνίες θ και ϕ των σφαιρικών συντεταγμένων.

Κατά συνέπεια η Εξ. (1.59) έχει λύση:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{G}_{\ell m}(\mathbf{r}) = C f_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{C f_{\ell}(qr)}{\ell(\ell+1)} \mathbf{L}^2 Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.61)$$

όπου C μια σταθερά ανεξάρτητη του \mathbf{r} .

Ορίζοντας τις διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές:

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.62)$$

η Εξ. (1.61) γράφεται:

$$\mathbf{L} \cdot \left[\mathbf{G}_{\ell m} - \frac{C}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] = 0 \quad (1.63)$$

Επιλέγοντας: $C = \frac{i}{q} \sqrt{\ell(\ell+1)}$ προκύπτει τελικά ότι η:

$$\mathbf{F}_{H\ell m} = \nabla \times \mathbf{G}_{\ell m} = \frac{i}{q} \nabla \times [f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (1.64)$$

είναι λύση της Εξ. (1.56). Έχουμε: $\mathbf{r} \times \nabla = r \hat{\mathbf{r}} \times \left[\partial_r \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \partial_{\theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_{\phi} \hat{\phi} \right] = \hat{\phi} \partial_{\theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \partial_{\phi}$
Επομένως για $\ell \geq 1$:

$$\begin{aligned} \sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= -i(\mathbf{r} \times \nabla) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = i \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} \hat{\theta} - \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} \hat{\phi} \right] = \\ &= [a_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{\ell}^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}})] \hat{\theta} + \\ &\quad + i [a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}})] \hat{\phi} = \\ &= a_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{z}} + a_{\ell}^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) \end{aligned} \quad (1.65)$$

όπου: $a_{\ell}^m = \frac{1}{2} \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$ και $\mathbf{X}_{00}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$. Η αναλυτική απόδειξη της Εξ. (1.65) γίνεται στο Παράρτημα Γ'.

Αν το διανυσματικό πεδίο \mathbf{F} είναι λύση της εξίσωσης Helmholtz (1.56) και εφόσον ισχύει ότι $\nabla \cdot \mathbf{F} = 0$, για το $\nabla \times \mathbf{F}$ έχουμε:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) = 0 \quad (1.66)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{F}) - \nabla^2 \mathbf{F} = -\nabla^2 \mathbf{F} = q^2 \mathbf{F} \quad (1.67)$$

$$\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{F})] = \nabla [\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F})] - \nabla^2 (\nabla \times \mathbf{F}) \quad (1.68)$$

Και αντικαθιστώντας τις Εξ. (1.66) και (1.67) στην Εξ. (1.68) παίρνουμε:

$$-\nabla^2 (\nabla \times \mathbf{F}) = \nabla \times (q^2 \mathbf{F}) \Rightarrow \nabla^2 (\nabla \times \mathbf{F}) + q^2 (\nabla \times \mathbf{F}) = 0 \quad (1.69)$$

Συνεπώς, μια άλλη λύση της εξίσωσης Helmholtz είναι η: $\mathbf{F}_{H\ell m} = C \nabla \times [\nabla \times (f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}))]$. Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών (Παράρτημα Β') η $\mathbf{F}_{H\ell m}$ μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{H\ell m} &= C \nabla \times [\nabla \times (f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}))] = \\ &= C \nabla [\nabla \cdot (f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}))] - C \nabla^2 [f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = \\ &= C q^2 f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (1.70)$$

Επιλέγοντας $C = \frac{1}{q^2}$ τελικά παίρνουμε ότι η:

$$\mathbf{F}_{H\ell m} = f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.71)$$

ικανοποιεί την Εξ. (1.56).

Τα διανυσματικά πεδία $\mathbf{F}_{E\ell m}$ και $\mathbf{F}_{H\ell m}$ που δίνονται από τις Εξ. (1.64) και (1.71) ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\nabla \times \mathbf{F}_{E\ell m}(\mathbf{r}) = i q \mathbf{F}_{H\ell m}(\mathbf{r}) \quad (1.72)$$

$$\nabla \times \mathbf{F}_{H\ell m}(\mathbf{r}) = -i q \mathbf{F}_{E\ell m}(\mathbf{r}) \quad (1.73)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_{E\ell m} = 0 \quad (1.74)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_{H\ell m} = 0 \quad (1.75)$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των συναρτήσεων Bessel και των βαθμωτών και των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών, άμεσα αποδεικνύονται οι σχέσεις ορθογωνιότητας:

$$\iint d\theta d\phi \bar{\mathbf{F}}_{E\ell m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{E\ell' m'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\ell + 1} [(\ell + 1)f_{\ell-1}^2(qr) - \ell f_{\ell+1}^2(qr)] \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (1.76)$$

$$\iint d\theta d\phi \bar{\mathbf{F}}_{H\ell m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}) = f_{\ell}^2(qr) \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (1.77)$$

$$\iint d\theta d\phi \bar{\mathbf{F}}_{H\ell m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{E\ell' m'}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.78)$$

Τα πεδία αυτά αποτελούν πλήρη βάση για την ανάπτυξη κάθε εγκάρσιου διανυσματικού πεδίου. Το ηλεκτρικό πεδίο με τη μορφή της Εξ. (1.71) είναι κάθετο στο ακτινικό διάνυσμα \mathbf{r} επομένως τα αντίστοιχα πεδία ονομάζονται εγκάρσια ηλεκτρικά (TE), ενώ όταν το ηλεκτρικό πεδίο είναι της μορφής της Εξ. (1.64) το αντίστοιχο μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στο διάνυσμα \mathbf{r} και κατά συνέπεια τα πεδία αυτά ονομάζονται εγκάρσια μαγνητικά (TM).

1.6 Πολυπολικό ανάπτυγμα του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου

Ένα πλήρες σύνολο λύσεων των Εξ. (1.13)-(1.16) για εγκάρσια πεδία δεδομένης συχνότητας ω , όπως αποδείχθηκε, αποτελούν οι λύσεις:

$$\mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}) = j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.79)$$

$$\mathbf{H}_{H\ell m}(\mathbf{r}) = h_{\ell}^{+}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.80)$$

και

$$\mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}) \quad (1.81)$$

$$\mathbf{H}_{E\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times h_{\ell}^{+}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{H}_{H\ell m}(\mathbf{r}) \quad (1.82)$$

Οι λύσεις \mathbf{J} έχουν ομαλή συμπεριφορά παντού, ενώ οι λύσεις \mathbf{H} απειρίζονται στο $r = 0$ και έχουν τη μορφή σφαιρικών κυμάτων για $r \rightarrow \infty$ (Παράρτημα Α'). Για απλότητα στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τον δείκτη L για να συμβολίσουμε συλλογικά τους δείκτες $P\ell m$, όπου: $P = E, H$, $\ell = 1, 2, \dots$ και $m = -\ell, \dots, \ell$.

Σε ένα ομοιογενές και οπτικά ιστροπικό μέσο, για μια δεδομένη συχνότητα ω , το ηλεκτρικό πεδίο μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδιασμός των $\mathbf{J}_L(\mathbf{r})$ και $\mathbf{H}_L(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_L [a_L^0 \mathbf{J}_L(\mathbf{r}) + a_L^+ \mathbf{H}_L(\mathbf{r})] \quad (1.83)$$

ενώ από την Εξ. (1.24) και την Εξ. (1.83) για το μαγνητικό πεδίο έχουμε αντίστοιχα:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega\mu_0\mu} \sum_L [a_L^0 \nabla \times \mathbf{J}_L(\mathbf{r}) + a_L^+ \nabla \times \mathbf{H}_L(\mathbf{r})] \quad (1.84)$$

όπου οι συντελεστές a_L^0 και a_L^+ πρέπει να προσδιοριστούν.

Έστω ένα εγκάρσιο επίπεδο κύμα της μορφής (1.23). Το κύμα αυτό είναι πεπερασμένο σε όλο το χώρο και επομένως το πολυπολικό ανάπτυγμα του σε σφαιρικά κύματα πρέπει να περιέχει μόνο τις συναρτήσεις Bessel, $j_\ell(qr)$. Δηλαδή:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_L [a_L^0 \mathbf{J}_L(\mathbf{r})] = \sum_{\ell m} [a_{E\ell m}^0 \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}) + a_{H\ell m}^0 \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r})] = \\ &= \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \end{aligned} \quad (1.85)$$

και:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega\mu_0\mu} \sum_{\ell m} [a_{E\ell m}^0 \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}) + a_{H\ell m}^0 \nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r})] \quad (1.86)$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των σφαιρικών αρμονικών (Παράρτημα Β', Εξ. (Β'.24) και (Β'.26)) έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{q} \nabla \times (\nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) = \\ &= \frac{i}{q} \{ \nabla [\nabla \cdot (j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}))] - \nabla^2 (j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) \} = \\ &= -\frac{i}{q} \nabla^2 (j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) = iq j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (1.87)$$

και

$$\nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}) = \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.88)$$

Συνεπώς το ανάπτυγμα του $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\omega\mu_0\mu} \sum_{\ell m} [iq a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] = \\ &= \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \end{aligned} \quad (1.89)$$

Γράφοντας τους συντελεστές με τη μορφή:

$$a_L^0 = \mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \quad (1.90)$$

με τα διανύσματα $\mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}})$ να ανήκουν στο επίπεδο που ορίζουν το πολικό και το αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, $\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q})$ και $\hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})$, αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα (Παράρτημα Δ):

$$e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} \left[i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (1.91)$$

προκύπτουν (Παράρτημα Ε')

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{Elm}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \times \\
&\times \left\{ i \left[a_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) - \right. \\
&- \left[a_\ell^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \right. \\
&+ \left. \left. a_\ell^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \right\} = \\
&= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \times \hat{\mathbf{q}}
\end{aligned} \tag{1.92}$$

Και:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{Hlm}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \times \\
&\times \left\{ \left[a_\ell^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. a_\ell^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) + \right. \\
&+ \left. i \left[a_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \right\} = \\
&= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}})
\end{aligned} \tag{1.93}$$

όπου θ και ϕ οι γωνιακές συντεταγμένες του \mathbf{q} και $a_\ell^m = \frac{1}{2} \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$.

2 Μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης

2.1 Σκέδαση από μεμονωμένο σφαιρικό σωματίδιο

Έστω ένα ομοιογενές και ιστροπικό σφαιρικό σωματίδιο ακτίνας S , τοποθετημένο στην αρχή των αξόνων του συστήματος συντεταγμένων. Θεωρούμε ότι το σωματίδιο αυτό έχει σχετική διηλεκτρική σταθερά, ϵ_s , και σχετική μαγνητική διαπερατότητα, μ_s , διαφορετικές από αυτές του μέσου στο οποίο βρίσκεται, ϵ, μ . Επιπλέον δεχόμαστε ότι οι ϵ_s και μ_s είναι εν γένει μιγαδικές συναρτήσεις της συχνότητας ω .

Έστω ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει σε αυτό το σωματίδιο. Τότε στο εξωτερικό αυτού θα υπάρχει το προσπίπτον κύμα, $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$, και το σκεδαζόμενο από το σωματίδιο κύμα, $\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r})$, ενώ το πεδίο εντός του σωματιδίου συμβολίζεται ως $\mathbf{E}_{in}(\mathbf{r})$. Μπορούμε να γράψουμε τα πεδία αυτά σε αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων, όπως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα, ως:

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

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

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

Το προσπίπτον κύμα είναι ομαλό σε όλο το χώρο και το κύμα εντός του σωματιδίου πρέπει να είναι ομαλό στην αρχή των αξόνων, επομένως για το ανάπτυγμα επιλέγουμε μόνο τους όρους $\mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r})$. Ο δείκτης (s) στην περίπτωση του κύματος στο εσωτερικό του σωματιδίου εκφράζει ότι σε αυτήν την περίπτωση ο κυματαριθμός $q = \omega \frac{\sqrt{\epsilon\mu}}{c}$ στις Εξ. (1.79) και (1.81) αντικαθίσταται από τον κυματαριθμό $q_s = \omega \frac{\sqrt{\epsilon_s\mu_s}}{c}$. Το σκεδαζόμενο, όμως, κύμα θέλουμε να έχει μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων και κατά συνέπεια επιλέγουμε για το ανάπτυγμα μόνο τους όρους $\mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r})$, λόγω της ιδιότητάς τους για $r \rightarrow \infty$ (Παράρτημα Α):

$$h_{\ell}^+(x) \sim (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \quad (2.4)$$

Συνεπώς, για την περίπτωση του σφαιρικού σωματιδίου η αναλυτική μορφή των πεδίων είναι:

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^0 \nabla \times j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^0 j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.5)$$

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^+ \nabla \times h_{\ell}^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^+ h_{\ell}^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.6)$$

$$\mathbf{E}_{in}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q_s} a_{E\ell m}^{in} \nabla \times j_{\ell}(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^{in} j_{\ell}(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.7)$$

ενώ τα πεδία $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, αντίστοιχα με την Εξ. (1.89), δίνονται από τις σχέσεις:

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.8)$$

$$\mathbf{H}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^+ \nabla \times h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.9)$$

$$\mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^{\text{in}} \nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (2.10)$$

Οι συντελεστές a_L^+ του σκεδαζόμενου κύματος συνδέονται με τους συντελεστές του προσπίπτοντος κύματος a_L^0 μέσω του πίνακα σκέδασης \mathbf{T} :

$$a_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} a_{L'}^0 \quad (2.11)$$

Για ισοτροπικούς ομοιογενείς σκεδαστές με σφαιρική συμμετρία ο πίνακας αυτός είναι διαγώνιος ως προς P και ℓ και ανεξάρτητος του m . Δηλαδή έχουμε:

$$a_{P\ell m}^+ = T_{P\ell} a_{P\ell m}^0 \quad (2.12)$$

Ο πίνακας \mathbf{T} προσδιορίζεται από τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των εφαπτομενικών συνιστωσών των πεδίων στην επιφάνεια του σφαιρικού σωματιδίου, $r = S$. Συνεπώς, σε αυτό το πρόβλημα έχουμε:

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

όπου

$$\mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

$$\mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

Αντικαθιστώντας στις προηγούμενες σχέσεις και ολοκληρώνοντας στη στερεά γωνία βρίσκουμε τελικά τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης:

$$T_{E\ell} = \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{q_s S} \epsilon_s} \quad (2.19)$$

$$T_{H\ell} = \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{q_s S} \mu_s} \quad (2.20)$$

Η αναλυτική απόδειξη των Εξ. (2.19) και (2.20) γίνεται στο Παράρτημα Γ'.

Όσο το qS δεν είναι πολύ μεγαλύτερο της μονάδας μόνο μερικοί όροι του αναπτύγματος της Εξ. (2.6) επαρκούν για την περιγραφή του σκεδαζόμενου πεδίου. Οι όροι αυτοί αντιστοιχούν σε $\ell \leq \ell_{\text{max}}$ και επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι συντελεστές a_L^+ είναι ίσοι με 0 για $\ell > \ell_{\text{max}}$. Σε περίπτωση που το σχήμα του σωματιδίου αποκλίνει από τη σφαίρα ή το σύστημα προς μελέτη έχει κάποια άλλη δομή ο αντίστοιχος αριθμός όρων που πρέπει να κρατήσουμε στα αντίστοιχα αναπτύγματα είναι μεγαλύτερος του ℓ_{max} .

2.2 Θεωρία πολλαπλής σκέδασης

Έστω σύστημα μη αλληλεπικαλυπτόμενων σκεδαστών, διατεταγμένων σε θέσεις \mathbf{R}_n , σε ομοιογενές περιβάλλον. Με χρήση των μαθηματικών ταυτοτήτων³:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} \left[i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (2.21)$$

$$\frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(qr_<) h_\ell^+(qr_>) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \quad (2.22)$$

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:

$$h_{\ell'}^+(qr_{n'}) Y_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) = \sum_{\ell m} G_{\ell' m'; \ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) \quad (2.23)$$

όπου $\mathbf{R}_{nn'} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$ το διάνυσμα από τον σκεδαστή n' στον σκεδαστή n , $\mathbf{r}_{n'} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}$ η σχετική θέση ως προς τον σκεδαστή n' και $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$ η σχετική θέση ως προς τον σκεδαστή n . Οι συντελεστές $G_{\ell m; \ell' m'}$ δίνονται από την σχέση:

$$G_{\ell m; \ell' m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) = 4\pi \sum_{\ell'' m''} (-1)^{\frac{\ell - \ell' - \ell''}{2}} (-1)^{m' + m''} B_{\ell m}(\ell'' m''; \ell' m') \times \\ \times h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell'' - m''}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \quad (2.24)$$

με

$$B_{\ell m}(\ell'' m''; \ell' m') = \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' - m'}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell'' m''}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.25)$$

Οι Εξ. (2.23), (2.24) και (2.25) αποδεικνύονται αναλυτικά στο Παράρτημα Ζ'.

Αντίστοιχα, για τα εξερχόμενα διανυσματικά σφαιρικά κύματα μπορούμε να γράψουμε:

$$\mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_L \Omega_{LL'}^{nn'} \mathbf{J}_L(\mathbf{r}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) \quad (2.26)$$

Από τις Εξ. (1.81) και (1.82) και δρώντας με $i/q \nabla \times$ στην Εξ. (2.26) προκύπτει ότι:

$$\Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \quad (2.27)$$

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'} \quad (2.28)$$

ενώ

$$\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \frac{1}{j_\ell(qr_n)} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (2.29)$$

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\frac{qr_n}{\sqrt{\ell(\ell+1)} j_\ell(qr_n)} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (2.30)$$

Η απόδειξη των παραπάνω σχέσεων παρουσιάζεται στο Παράρτημα Η'.

Από την Εξ. (1.80) αντικαθιστώντας την αναλυτική μορφή των $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ και την Εξ. (2.23) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{H\ell'm'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \frac{1}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \sum_{\ell''m''} \left[a_{\ell'}^{-m'} G_{\ell'm'-1;\ell''m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q)(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + \right. \\ &\quad + a_{\ell'}^{m'} G_{\ell'm'+1;\ell''m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q)(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) + \\ &\quad \left. + m' G_{\ell'm';\ell''m''}(\mathbf{R}_{nn'}; q)\hat{\mathbf{z}} \right] j_{\ell''}(qr_n) Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{r}}_n) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Συνεπώς, αντικαθιστώντας την Εξ. (2.31) στην Εξ. (2.29) βρίσκουμε ότι:

$$\begin{aligned} \Omega_{H\ell m; H\ell'm'}^{nn'} &= \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left[2a_{\ell}^{-m} a_{\ell'}^{-m'} G_{\ell'm'-1;\ell m-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + \right. \\ &\quad \left. + mm' G_{\ell'm';\ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + 2a_{\ell}^m a_{\ell'}^{m'} G_{\ell'm'+1;\ell m+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \right] \end{aligned} \quad (2.32)$$

Αντίστοιχα, με αντικατάσταση της Εξ. (2.31) στην Εξ. (2.30) και χρησιμοποιώντας το ολοκλήρωμα (B'.12) βρίσκουμε ότι:

$$\Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} = \frac{-qr_n}{j_{\ell}(qr_n)\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left[j_{\ell+1}(qr_n)\mathcal{F}_{\ell'm';\ell m}^+ + j_{\ell-1}(qr_n)\mathcal{F}_{\ell'm';\ell m}^- \right] \quad (2.33)$$

όπου:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^+ &= 2a_{\ell}^{-m} \gamma_{\ell'+1}^{-m'+1} G_{\ell m-1;\ell'+1m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + m \zeta_{\ell'+1}^{m'} G_{\ell m;\ell'+1m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) - \\ &\quad - 2a_{\ell}^m \gamma_{\ell'+1}^{m'+1} G_{\ell m+1;\ell'+1m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \end{aligned} \quad (2.34)$$

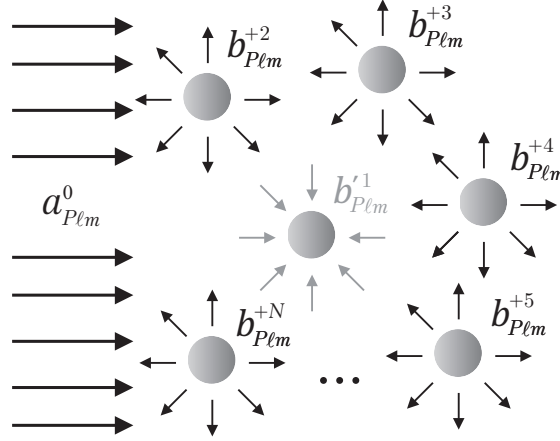
$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^- &= -2a_{\ell}^{-m} \gamma_{\ell'}^{m'} G_{\ell m-1;\ell'-1m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + m \zeta_{\ell'}^{m'} G_{\ell m;\ell'-1m'}(\mathbf{R}_{nn'}; q) + \\ &\quad + 2a_{\ell}^m \gamma_{\ell'}^{-m'} G_{\ell m+1;\ell'-1m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Από τις Εξ. (2.24) και (2.25) προκύπτει ότι η διαφορά των \mathcal{F}^+ και \mathcal{F}^- είναι ίση με:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^+ - \mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^- &= 4\pi \sum_{\ell''m''} i^{\ell-\ell'-\ell''-1} (-1)^{m'+m''-1} h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell''-m''}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \times \\ &\quad \times \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{r}}) \left\{ -m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \left[\zeta_{\ell'+1}^{m'} Y_{\ell'+1-m'}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'}(\hat{\mathbf{r}}) \right] + \right. \\ &\quad + 2a_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \left[\gamma_{\ell'+1}^{-m'+1} Y_{\ell'+1-m'+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] - \\ &\quad \left. - 2a_{\ell}^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \left[\gamma_{\ell'+1}^{m'+1} Y_{\ell'+1-m'-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{-m'} Y_{\ell'-1-m'-1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Με χρήση των Εξ. (B'.8) και (B'.9) και της ιδιότητας (B'.6) βρίσκουμε ότι το ολοκλήρωμα της Εξ. (2.36) είναι ίσο με μηδέν. Συνεπώς:

$$\mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^+ = \mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^- \quad (2.37)$$



Σχήμα 4: Το κύμα που προσπίπτει στον σχεδιαστή 1 ισούται με το άθροισμα του εξωτερικά προσπίπτοντος κύματος και των εξερχόμενων κυμάτων από όλους τους άλλους σχεδιαστές.

και άρα με χρήση της Εξ. (Α'.3), τελικά παίρνουμε ότι:

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \frac{2\ell + 1}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}\sqrt{\ell'(\ell' + 1)}} \left[2a_{\ell'}^{-m'} \gamma_{\ell}^m G_{\ell' m'; \ell - 1 m - 1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) - \right. \\ \left. - m' \zeta_{\ell}^m G_{\ell' m'; \ell - 1 m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) - 2a_{\ell'}^{m'} \gamma_{\ell}^{-m} G_{\ell' m'; \ell + 1 m + 1}(\mathbf{R}_{nn'}; q) \right] \quad (2.38)$$

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

Συνεπώς, ένα εξερχόμενο κύμα από έναν σχεδιαστή στη θέση $\mathbf{R}_{n'}$, $\sum_{L'} b_{L'}^{+n'} \mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'})$, μπορεί να γραφεί σαν εισερχόμενο σε έναν σχεδιαστή στη θέση \mathbf{R}_n , $\sum_L b_L^{+n}(n') \mathbf{J}_L(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$. Οι συντελεστές $b_L^{+n}(n')$ και $b_{L'}^{+n'}$ συνδέονται μέσω του πίνακα Ω :

$$b_L^{+n}(n') = \sum_{L'} \Omega_{LL'}^{nn'} b_{L'}^{+n'} \quad (2.39)$$

Στη θέση \mathbf{R}_n προσπίπτει το άθροισμα των κυμάτων που εξέρχονται από όλους τους άλλους σχεδιαστές όπως και το εξωτερικά προσπίπτον κύμα (Σχ.4). Επομένως το σχεδιαζόμενο από το σωματίδιο στη θέση \mathbf{R}_n κύμα προσδιορίζεται από το ολικό προσπίπτον σε αυτό κύμα μέσω των συντελεστών:

$$b_L^{+n} = \sum_{L'} T_{LL'}^n \left[a_{L'}^{0n} + \sum_{n' \neq n} b_{L'}^{+n'}(n') \right] \quad (2.40)$$

όπου $T_{LL'}^n$ τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης για μεμονωμένο σχεδιαστή για το σωματίδιο στη θέση \mathbf{R}_n και $a_{L'}^{0n}$ οι συντελεστές του πολυπολικού αναπτύγματος γύρω από τη θέση \mathbf{R}_n του εξωτερικά προσπίπτοντος κύματος. Αντικαθιστώντας την Εξ. (2.39) στην Εξ. (2.40) παίρνουμε:

$$\sum_{n'L'} \left[\delta_{nn'} \delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''}^n \Omega_{L''L'}^{nn'} \right] b_{L'}^{+n'} = \sum_{L'} T_{LL'}^n a_{L'}^{0n} \quad (2.41)$$

Στην περίπτωση μιας περιοδικής δομής που ορίζεται από τα διανύσματα πλέγματος Bravais, \mathbf{R}_λ , και τα μη θεμελιώδη διανύσματα, \mathbf{t}_α , που ορίζουν τις θέσεις των σχεδαστών στη μοναδιαία κυψελίδα, ο δείκτης της πλεγματικής θέσης, n , μπορεί να αντικατασταθεί από το σύνθετο δείκτη $\lambda\alpha$. Από το θεώρημα Bloch:

$$b_{L'}^{+\lambda\alpha'} = e^{i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}_{\lambda'}-\mathbf{R}_\lambda]} b_{L'}^{+\lambda\alpha'} \quad (2.42)$$

Μηδενίζοντας επομένως το εξωτερικά προσπίπτον κύμα στην Εξ. (2.41) παίρνουμε την καταστατική εξίσωση:

$$\det \left[\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''}^\alpha \Omega_{L''L'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \right] = 0 \quad (2.43)$$

όπου:

$$\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda'} \Omega_{LL'}^{nn'} e^{-i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}_\lambda-\mathbf{R}_{\lambda'}]} \quad (2.44)$$

το οποίο είναι ανεξάρτητο του λ , και:

$$\Omega_{LL'}^{nn'} = \frac{1}{v} \int_{ZB} d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}_\lambda-\mathbf{R}_{\lambda'}]} \Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \quad (2.45)$$

όπου v ο όγκος της πρώτης ζώνης Brillouin.

Η Εξ. (2.43) σε πραγματικούς υπολογισμούς συγκλίνει γρήγορα με τις διαστάσεις των πινάκων και αρκεί να αποκοπεί ο δείκτης της στροφορμής, ℓ , σε κάποια σχετικά μικρή τιμή, ℓ_{\max} , παρόλο που οι πίνακες είναι απείρων διαστάσεων. Τα στοιχεία $T_{LL'}^\alpha$ εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες ενός σχεδαστή, ενώ τα $\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ εξαρτώνται μόνο από τη γεωμετρία και ονομάζονται σταθερές δομής. Και τα $T_{LL'}^\alpha$ και τα $\Omega_{LL'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$ είναι συναρτήσεις της συχνότητας. Ο υπολογισμός των σταθερών δομής αρκεί να γίνει μόνο μια φορά για ένα δεδομένο πλέγμα.

2.3 Σκέδαση από δισδιάστατη περιοδική δομή

Μέσω της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης (LMS) μπορούν να υπολογιστούν θεωρητικά, με χρήση κατάλληλου λογισμικού όπως το MULTTEM⁶, τόσο η φωτονική μιγαδική δομή ζωνών για άπειρο κρύσταλλο όσο και οι συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης για πρόσπτωση φωτός οποιασδήποτε πόλωσης και οποιασδήποτε γωνίας πρόσπτωσης σε πεπερασμένο τμήμα κρυστάλλου. Η μέθοδος εφαρμόζεται για δομές διαδοχικών στρωμάτων, τα οποία μπορούμε να επιλέξουμε να είναι κάθετα στον άξονα z . Η δομή μπορεί να είναι άπειρη ή πεπερασμένη στη διεύθυνση z αλλά σε κάθε περίπτωση αποτελείται από σύνθετα πλακίδια ενός ή περισσότερων στρωμάτων, το κάθε ένα από τα οποία περιλαμβάνει μη-επικαλυπτόμενους σχεδαστές τοποθετημένους σε δισδιάστατο πλέγμα παράλληλο στο επίπεδο $x-y$. Η ίδια δισδιάστατη περιοδικότητα πρέπει να διατηρείται σε όλη την έκταση του πλακιδίου.

Έστω μια δισδιάστατη περιοδική δομή σχεδαστών στο επίπεδο $x-y$, στη θέση $z = 0$, εντός ιστροπικού και ομοιογενούς μέσου. Θεωρούμε ότι τα κέντρα των σχεδαστών είναι τοποθετημένα στις πλεγματικές θέσεις που καθορίζονται από τα διανύσματα:

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (2.46)$$

όπου $n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ και $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ τα θεμελιώδη διανύσματα του δισδιάστατου πλέγματος στο επίπεδο $x-y$. Το αντίστοιχο δισδιάστατο αντίστροφο πλέγμα ορίζεται ως:

$$\mathbf{g} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \quad (2.47)$$

όπου $m_1, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ και $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ τα θεμελιώδη ανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2 \quad (2.48)$$

Η παράλληλη στο επίπεδο $x-y$ συνιστώσα του κυματανύσματος ενός επίπεδου προσπίπτοντος κύματος, \mathbf{q}_{\parallel} , μπορεί να γραφεί ως:

$$\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}' \quad (2.49)$$

όπου το \mathbf{k}_{\parallel} είναι η παράλληλη στο επίπεδο $x-y$ και ανηγμένη στην επιφανειακή ζώνη Brillouin συνιστώσα του κυματανύσματος και \mathbf{g}' ένα κατάλληλο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος. Για δεδομένο \mathbf{q}_{\parallel} ο προσδιορισμός του \mathbf{k}_{\parallel} είναι δυνατός μέσω διαδοχικών αφαιρέσεων διαφόρων διανυσμάτων του αντίστροφου πλέγματος, ξεκινώντας από αυτά που έχουν μικρότερο μήκος και συνεχίζοντας με αυτά όλο και μεγαλύτερου μήκους, μέχρι να βρεθεί κατάλληλο \mathbf{g}' ώστε η διαφορά $\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{g}'$ να ανήκει στην επιφανειακή ζώνη Brillouin. Από τις Εξ. (2.49) και (2.48) παίρνουμε:

$$e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n} = e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (2.50)$$

αφού το $\mathbf{g}' \cdot \mathbf{R}_n$ θα είναι πολλαπλάσιο του 2π . Δεδομένου του μέτρου του κυματανύσματος στο εσωτερικό του μέσου, $q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon \mu}$, και της παράλληλης συνιστώσας του στο επίπεδο $x-y$, $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{g}'$, γράφουμε το κυματάνυσμα ενός επιπέδου κύματος ως:

$$\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{\pm} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}' \pm [q^2 - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}')^2]^{1/2} \hat{\mathbf{z}} \quad (2.51)$$

όπου το $+$ αντιστοιχεί σε διαδιδόμενο προς τα δεξιά κύμα και το $-$ αντιστοιχεί σε διαδιδόμενο προς τα αριστερά κύμα. Όταν $(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}')^2 > q^2$ το αντίστοιχο κύμα φθίνει εκθετικά στα δεξιά του επιπέδου για το $+$, και στα αριστερά του επιπέδου για το $-$.

Έτσι, ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στην επίπεδη διάταξη, επιλέγοντας ως αρχή των συντεταγμένων έναν τυχαίο σκεδαστή, γράφεται ως:

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) \quad (2.52)$$

όπου $s' = +, -$ και $\hat{\mathbf{e}}_{p'}$ τα μοναδιαία διανύσματα που αντιστοιχούν στην πολική ($p' = 1$, πόλωση TM) ή την αζιμουθιακή ($p' = 2$, πόλωση TE) συνιστώσα του πεδίου. Τα $\hat{\mathbf{e}}_p$ σε καρτεσιανές συντεταγμένες ορίζονται ως:

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

όπου θ, ϕ οι γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$. Όταν $(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 > q^2$ η z συνιστώσα του $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ είναι μιγαδική και τα $\cos \theta$ και $\sin \theta$ στις παραπάνω σχέσεις πρέπει να αντικατασταθούν από τα $K_{\mathbf{g}z}^s/q$ και $|\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}|/q$, αντίστοιχα, με αποτέλεσμα το διάνυσμα $\hat{\mathbf{e}}_1$ να γίνεται μιγαδικό.

Το σχεδαζόμενο κύμα μπορεί να γραφεί ως άθροισμα εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων με κέντρα τις θέσεις των σχεδαστών, \mathbf{R}_n , κάθε ένα από τα οποία θα διαφέρει από το σχεδαζόμενο από τον σχεδαστή στη θέση $\mathbf{R}_n = 0$ κύμα κατά τον φασικό παράγοντα $e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n}$ λόγω της περιοδικότητας του πλέγματος. Συνεπώς, μπορεί να γραφεί ως:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{L}} b_{\mathbf{L}}^+ \mathbf{H}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_n) = \\ &= \sum_{\ell m} \left[\frac{1}{q} b_{E\ell m}^+ \nabla \times \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n)} h_{\ell}^+(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) + b_{H\ell m}^+ \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n} h_{\ell}^+(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right] \end{aligned} \quad (2.53)$$

όπου $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$. Τα $b_{\mathbf{L}}^+$ καθορίζονται από το συνολικά προσπίπτον στον κεντρικό σχεδαστή κύμα, δηλαδή από το άθροισμα του εξωτερικά προσπίπτοντος κύματος και του σχεδαζόμενου από τα άλλα σωματίδια κύματος, $\mathbf{E}'_{\text{sc}}(\mathbf{r})$. Το $\mathbf{E}'_{\text{sc}}(\mathbf{r})$ μπορεί να βρεθεί από την Εξ. (2.53) αφαιρώντας τον όρο για $\mathbf{R}_n = 0$ και μπορεί να αναπτυχθεί σε σφαιρικά κύματα με κέντρο την αρχή των συντεταγμένων:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_{\text{sc}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{L}} b'_{\mathbf{L}} \mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ \mathbf{E}'_{\text{sc}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} b'_{E\ell m} \nabla \times j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + b'_{H\ell m} j_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \end{aligned} \quad (2.54)$$

με

$$b'_{\mathbf{L}} = \sum_{\mathbf{L}'} \Omega_{\mathbf{L}\mathbf{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel}) b_{\mathbf{L}'}^+ \quad (2.55)$$

όπου τα στοιχεία $\Omega_{\mathbf{L}\mathbf{L}'}$ είναι ο μετασχηματισμός Fourier των $\Omega_{\mathbf{L}\mathbf{L}'}^{nn'}$ της Εξ. (2.45) για $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel}$, 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 $-\mathbf{R}_n$. Το $\Omega_{\mathbf{L}\mathbf{L}'}$ εξαρτάται μόνο από τη γεωμετρία του πλέγματος και, μέσω του q , από τη συχνότητα και τη διηλεκτρική σταθερά του μέσου που περιβάλλει τους σχεδαστές. Ορίζοντας το μετασχηματισμό Fourier των $G_{\ell m; \ell' m'}(-\mathbf{R}_n; q)$:

$$Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \equiv \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n)} G_{\ell m; \ell' m'}(-\mathbf{R}_n; q) \quad (2.56)$$

και από τις Εξ. (2.32) και (2.38), προκύπτουν:

$$\begin{aligned} \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left[2a_{\ell}^{-m} a_{\ell'}^{-m'} Z_{\ell' m' -1}^{\ell m -1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) + \right. \\ &\quad \left. + m m' Z_{\ell' m'}^{\ell m}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) + 2a_{\ell}^m a_{\ell'}^{m'} Z_{\ell' m' +1}^{\ell m +1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right] = \Omega_{E\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \end{aligned} \quad (2.57)$$

και

$$\begin{aligned} \Omega_{E\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \frac{2\ell+1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left[2a_{\ell'}^{-m'} \gamma_{\ell}^m Z_{\ell' m' -1}^{\ell -1m -1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) - \right. \\ &\quad \left. - m' \zeta_{\ell}^m Z_{\ell' m'}^{\ell -1m}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) - 2a_{\ell'}^{m'} \gamma_{\ell}^{-m} Z_{\ell' m' +1}^{\ell -1m +1}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) \right] = -\Omega_{H\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Επομένως, για τον υπολογισμό του πίνακα $\mathbf{\Omega}$ πρέπει να προσδιοριστούν πρώτα τα στοιχεία του πίνακα \mathbf{Z} . Ο πίνακας αυτός συναντάται στη θεωρία περίθλασης ηλεκτρονίων χαμηλής ενέργειας (LEED) και τα στοιχεία του προσδιορίζονται με χρήση τεχνικών Ewald ή με αναλυτική άθροιση των πρώτων όρων στην περίπτωση γρήγορης σύγκλισης. Μια χρήσιμη ιδιότητα των στοιχείων του είναι:

$$Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad \text{εκτός αν } \ell + m + \ell' + m': \text{ άρτιος} \quad (2.59)$$

Κατά συνέπεια από τις Εξ. (2.57) και (2.58) προκύπτει ότι:

$$\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \Omega_{E\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad \text{εκτός αν } \ell + m + \ell' + m': \text{ άρτιος} \quad (2.60)$$

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \Omega_{H\ell m; E\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad \text{εκτός αν } \ell + m + \ell' + m': \text{ περιττός} \quad (2.61)$$

Οι συντελεστές b_L^+ που περιγράφουν το ολικό σχεδαζόμενο κύμα δίνονται από τη σχέση:

$$b_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'}(a_{L'}^0 + b_{L'}^+) \quad (2.62)$$

όπου $b_{L'}^+$ οι συντελεστές της Εξ. (2.54) για τα προσπίπτοντα κύματα από τους άλλους σχεδαστές και $a_{L'}^0$ οι συντελεστές που περιγράφουν το εξωτερικά προσπίπτον κύμα. Αντικαθιστώντας την Εξ. (2.55) στην Εξ. (2.62) παίρνουμε:

$$\sum_{L'} \left[\delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''} \Omega_{L''L'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] b_L^+ = \sum_{L'} T_{LL'} a_{L'}^0 \quad (2.63)$$

Αντίστοιχα με την Εξ. (1.90) το a_L^0 μπορεί να γραφεί ως:

$$a_L^0 = A_{L;p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) [E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'} \quad (2.64)$$

όπου τα \mathbf{A}_L^0 δίνονται από τις Εξ. (1.92) και (1.93). Η Εξ. (2.63) είναι γραμμική. Επομένως, μπορούμε να γράψουμε τα b_L^+ ως:

$$b_L^+ = B_{L;p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) [E_{in}]_{\mathbf{g}'p'}^{s'} \quad (2.65)$$

και κατά συνέπεια αντικαθιστώντας στην Εξ. (2.63) παίρνουμε:

$$\sum_{L'} \left[\delta_{LL'} - \sum_{L''} T_{LL''} \Omega_{L''L'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] B_{L';p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) = \sum_{L'} T_{LL'} A_{L';p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) \quad (2.66)$$

Το παραπάνω σύστημα είναι ένα γραμμικό σύστημα με άπειρο πλήθος εξισώσεων. Εισάγοντας μια τιμή ℓ_{\max} και αποκόπτοντας το ανάπτυγμα η διάσταση του συστήματος γίνεται $2\ell_{\max}(\ell_{\max} + 2)$ και χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες (2.60) και (2.61) καταλήγουμε σε δύο ανεξάρτητα συστήματα διάστασης $\ell_{\max}(\ell_{\max} + 2)$ το καθένα:

$$\sum_{o'} \left[\delta_{oo'} - \sum_{o''} T_{oo''} \Omega_{o''o'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] B_{o';p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) = \sum_{o'} T_{oo'} A_{o';p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) \quad (2.67)$$

$$\sum_{e'} \left[\delta_{ee'} - \sum_{e''} T_{ee''} \Omega_{e''e'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] B_{e';p'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) = \sum_{e'} T_{ee'} A_{e';p'}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) \quad (2.68)$$

όπου, αν αποδώσουμε στον δείκτη P τις τιμές 1, αντί του συμβόλου E , και 2, αντί του συμβόλου H , ο δείκτης ο/ε αντιστοιχεί σε $P + \ell + m$: περιττό/άρτιο.

Χρησιμοποιώντας τη σχέση⁹:

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n} h_{\ell}^+(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \quad (2.69)$$

όπου $A_0 = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ η επιφάνεια της θεμελιώδους κυψελίδας, μπορούμε να αλλάξουμε τη βάση των σκεδαζόμενων κυμάτων από τα δυανισματικά σφαιρικά κύματα (2.53) σε επίπεδα κύματα με ίδια ω και \mathbf{k}_{\parallel} :

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}^s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \quad (2.70)$$

Τα $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ έχουν την ίδια συχνότητα ω και το ίδιο \mathbf{k}_{\parallel} με το προσπίπτον κύμα και αντιστοιχούν σε περιθλώμενες δέσμες επιπέδων κυμάτων, διαφορετικών \mathbf{g} , αλλά ίδιων ω και \mathbf{k}_{\parallel} . Με αυτόν τον τρόπο το σκεδαζόμενο κύμα εκφράζεται ως επαλληλία περιθλώμενων δεσμών από τις οποίες μόνο αυτές που αντιστοιχούν σε πραγματικό $K_{\mathbf{g}z}^s$ περιγράφουν οδεύοντα κύματα. Οι συντελεστές $[E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s$ δίνονται από τη σχέση:

$$[E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s = \sum_{\mathbf{L}} \Delta_{\mathbf{L};\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) b_{\mathbf{L}}^+ \quad (2.71)$$

με

$$\begin{aligned} \Delta_{E\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+ \sqrt{\ell(\ell+1)}} \left\{ i \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) - \right. \\ &\quad - \left[a_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) + \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{\ell}^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right\} = \\ &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \times \hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s \end{aligned} \quad (2.72)$$

και

$$\begin{aligned} \Delta_{H\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+ \sqrt{\ell(\ell+1)}} \left\{ \left[a_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{\ell}^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) + \right. \\ &\quad \left. + i \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \right\} = \\ &= \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \end{aligned} \quad (2.73)$$

όπου θ, ϕ οι γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s$ (βλ. Παράρτημα Θ'). Αν το $K_{\mathbf{g}z}^s$ είναι φανταστικό τότε το $\cos \theta$ στις εκφράσεις των σφαιρικών αρμονικών $Y_{\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s)$ πρέπει να αντικατασταθεί από το $K_{\mathbf{g}z}^s/q$. Τα πλάτη $[E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s$ εξαρτώνται από τα $[E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s$ μέσω των $b_{\mathbf{L}}^+$ (Εξ. (2.71)) και άρα μέσω της Εξ. (2.65) από τα $B_{\mathbf{L};\mathbf{p}}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s)$, τα οποία υπολογίζονται από την Εξ. (2.66).

Έστω ένα επίπεδο κύμα της μορφής (2.52), που προσπίπτει στο επίπεδο των σχεδαστών από αριστερά. Στα δεξιά του επιπέδου τότε το προσπίπτον κύμα και το σχεδασζόμενο από το επίπεδο κύμα θα αποτελούν το συνολικά διερχόμενο κύμα, το οποίο μπορούμε να γράψουμε με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{tr}}^+(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_{\text{tr}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+ e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+), \quad z > 0 \quad (2.74)$$

Στα αριστερά του επιπέδου το ανακλώμενο κύμα μπορεί αντίστοιχα να γραφεί με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{rf}}^-(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_{\text{rf}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^- e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^-), \quad z < 0 \quad (2.75)$$

όπου:

$$[E_{\text{tr}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+ = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+ \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} + [E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+ = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{++} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+ \quad (2.76)$$

και

$$[E_{\text{rf}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^- = [E_{\text{sc}}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^- = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{--} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+ \quad (2.77)$$

Ο πίνακας $S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{++}$ ονομάζεται πίνακας διέλευσης και ο πίνακας $S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{--}$ ονομάζεται πίνακας ανάκλασης. Ο υπολογισμός αυτών των πινάκων γίνεται μέσω των Εξ. (2.76) και (2.77) αντικαθιστώντας τις (2.71) και (2.65). Προκύπτει, έτσι, ότι:

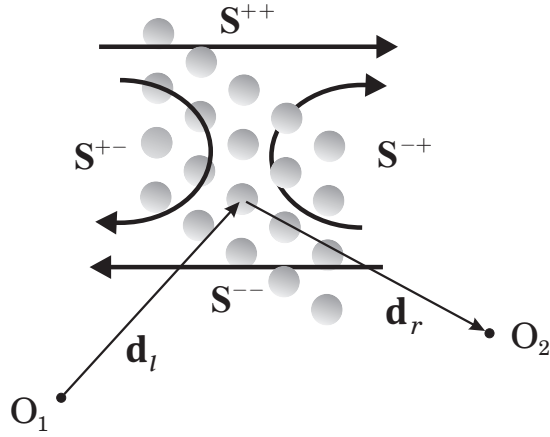
$$S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{ss'} = \delta_{ss'} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} + \sum_{\mathbf{L}} \Delta_{\mathbf{L};\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) B_{\mathbf{L};\mathbf{p}'}^+(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{s'}) \quad (2.78)$$

Στην περίπτωση πρόσπτωσης από δεξιά ορίζονται αντίστοιχα οι πίνακες $S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{--}$ και $S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{+-}$, οι οποίοι υπολογίζονται από την Εξ. (2.78) με $s' = -$. Αποδεικνύεται ότι:

$$S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{-s-s'} = (-1)^{\mathbf{p}+\mathbf{p}'} S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{ss'} \quad (2.79)$$

Η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης (LMS) εφαρμόζεται για τη μελέτη σύνθετων δομών που αποτελούνται από διαδοχικά επίπεδα κατά μήκος του άξονα z . Αυτά τα επίπεδα μπορούν να είναι επίπεδα σχεδαστών σε ομοιογενές μέσο, ομοιογενή πλακίδια ή επίπεδες διαχωριστικές επιφάνειες μεταξύ διαφορετικών ομοιογενών μέσων. Σε κάθε ένα από αυτά τα επίπεδα αντιστοιχεί κάποιος πίνακας σκέδασης. Η μελέτη της σύνθετης δομής προϋποθέτει τον κατάλληλο συνδιασμό των πινάκων που αντιστοιχούν στα επίπεδα που την συνθέτουν. Για να επιτευχθεί αυτό είναι χρήσιμο τα κύματα αριστερά και δεξιά από κάθε επίπεδο να εκφραστούν ως προς κατάλληλα τοπικά σημεία αναφοράς.

Έστω ένα σημείο, O_1 , στα αριστερά ενός δεδομένου επιπέδου που ορίζεται από το διάνυσμα θέσης \mathbf{A}_l σε σχέση με την αρχή των αξόνων και από το διάνυσμα $-\mathbf{d}_l$ σε σχέση με το κέντρο του επιπέδου. Αντίστοιχα, για δεξιά του επιπέδου, έστω το σημείο O_2 που ορίζεται από το \mathbf{A}_r ως προς την αρχή των αξόνων και από το \mathbf{d}_r από το κέντρο του επιπέδου. Είναι βολικό τα κύματα στα αριστερά και στα δεξιά του επιπέδου να εκφραστούν μέσω των διανυσμάτων $-\mathbf{d}_l$ και \mathbf{d}_r από το κέντρο του επιπέδου, αντίστοιχα, ώστε όλα τα κύματα στις περιοχές μεταξύ των



Σχήμα 5: Πίνακες ανάκλασης και διέλευσης για ένα επίπεδο σχεδαστών. Οι πίνακες μπορούν να εκφραστούν με χρήση των σημείων αναφοράς O_1 και O_2 , σε θέσεις $-\mathbf{d}_l$ και \mathbf{d}_r από το κέντρο του επιπέδου, αντίστοιχα.

διαδοχικών διεπιφανειών να έχουν το ίδιο σημείο αναφοράς. Με αυτόν τον τρόπο τα κύματα στα αριστερά ενός επιπέδου γράφονται με τη μορφή:

$$\sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{A}_l)} \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \quad (2.80)$$

και τα κύματα στα δεξιά του επιπέδου με τη μορφή:

$$\sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{A}_r)} \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \quad (2.81)$$

Συμβολίζοντας με \mathbf{Q} τους πίνακες που συνδέουν το πλάτος του προσπίπτοντος κύματος με τα πλάτη του διαθλώμενου και του ανακλώμενου κύματος όταν αυτά είναι εκφρασμένα ως προς τα τοπικά σημεία αναφοράς παίρνουμε:

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{++} e^{i(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l)} \quad (2.82)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{+-} e^{i(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{d}_r - \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r)} \quad (2.83)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{-+} e^{-i(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^+ \cdot \mathbf{d}_l)} \quad (2.84)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} = S_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{--} e^{-i(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^- \cdot \mathbf{d}_r)} \quad (2.85)$$

Σε συμπαγή μορφή οι πίνακες αυτοί γράφονται ως $\mathbf{Q}^{\text{I}}, \mathbf{Q}^{\text{II}}, \dots$ και έχουν την ίδια φυσική σημασία με τους αντίστοιχους πίνακες \mathbf{S} . Τα \mathbf{g} εκτείνονται μέχρι το άπειρο, αλλά κρατώντας έως g_{\max} στο πλήθος από τα διανύσματα με το μικρότερο μέτρο, οι πίνακες \mathbf{Q} αποκτούν διαστάσεις $2g_{\max} \times 2g_{\max}$.

2.4 Σκέδαση από ομοιογενές πλακίδιο

Έστω ένα ομοιογενές πλακίδιο, πάχους h , που συμβολίζεται ως μέσο $j = 2$, τοποθετημένο κάθετα στον άξονα z με την αριστερή του επιφάνεια στο $z = 0$ και τη δεξιά του επιφάνεια

στο $z = h$. Το πλακίδιο είναι τοποθετημένο μεταξύ δύο διαφορετικών, εν γένει, ημιάπειρων μέσων, $j = 1$ στα αριστερά και $j = 3$ στα δεξιά. Λόγω της συμμετρίας μεταφοράς παράλληλα στις επιφάνειες μπορούμε να γράψουμε το κυματάνυσμα ενός επιπέδου κύματος στο μέσο j ως:

$$\mathbf{q}_j^\pm = \mathbf{q}_\parallel \pm \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon_j \mu_j - \mathbf{q}_\parallel^2 \right]^{1/2} \hat{\mathbf{z}} \quad (2.86)$$

όπου με $+$ υποδηλώνουμε τη διάδοση κύματος προς τα δεξιά και με $-$ τη διάδοση κύματος προς τα αριστερά. Για $(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j > \mathbf{q}_\parallel^2$ το αντίστοιχο κύμα είναι φθίνον.

Για την εύρεση των πινάκων \mathbf{Q} αναπτύσσουμε τα κύματα αριστερά από το πλακίδιο ως προς το σημείο $\mathbf{A}_1 = (0, 0, 0)$ και τα κύματα δεξιά από το πλακίδιο ως προς το $\mathbf{A}_3 = (0, 0, h)$. Το ηλεκτρικό πεδίο που αντιστοιχεί στο προσπίπτον επίπεδο κύμα μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{in}}^{s'}(\mathbf{r}) = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^{s'} e^{i\mathbf{q}_j^{s'} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j]} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}'} \quad (2.87)$$

όπου για προσπίπτον κύμα από τα αριστερά έχουμε: $s' = +$, $j = 1$ και για προσπίπτον κύμα από τα δεξιά έχουμε: $s' = -$, $j = 3$. Αντίστοιχα το διερχόμενο κύμα μπορεί να γραφεί ως:

$$\mathbf{E}_{\text{tr}}^s(\mathbf{r}) = [E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{q}_j^s \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j]} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}} \quad (2.88)$$

όπου για προσπίπτον κύμα από τα αριστερά έχουμε: $s = +$, $j = 3$ και για προσπίπτον κύμα από τα δεξιά έχουμε: $s = -$, $j = 1$. Τέλος, το ανακλώμενο κύμα μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{rf}}^s(\mathbf{r}) = [E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{q}_j^s \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j]} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}} \quad (2.89)$$

όπου για προσπίπτον κύμα από τα αριστερά έχουμε: $s = -$, $j = 1$ και για προσπίπτον κύμα από τα δεξιά έχουμε: $s = +$, $j = 3$.

Τα πλάτη των κυμάτων σχετίζονται μέσω των σχέσεων:

$$[E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^+ = N_{\mathbf{p}}^{++} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^+ \quad (2.90)$$

$$[E_{\text{tr}}]_{\mathbf{p}}^- = N_{\mathbf{p}}^{--} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^- \quad (2.91)$$

$$[E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^- = N_{\mathbf{p}}^{-+} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^+ \quad (2.92)$$

$$[E_{\text{rf}}]_{\mathbf{p}}^+ = N_{\mathbf{p}}^{+-} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [E_{\text{in}}]_{\mathbf{p}'}^- \quad (2.93)$$

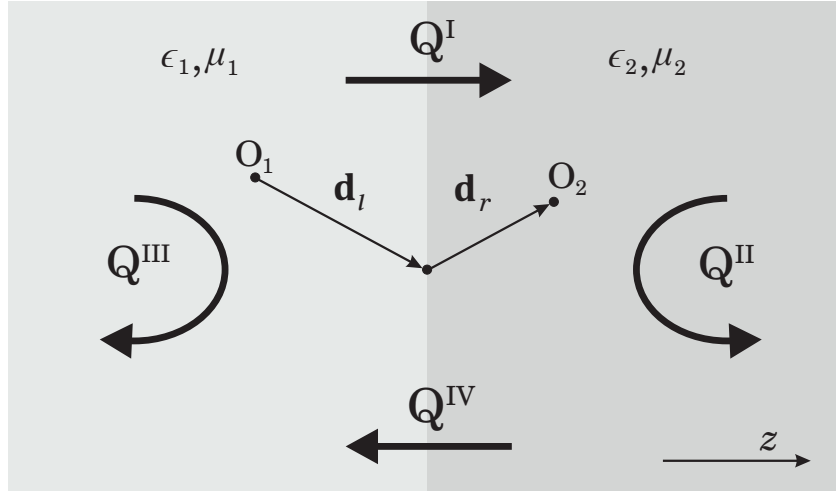
όπου τα $N_{\mathbf{p}}^{ss'}$ δίνονται από τις σχέσεις Fresnel (1.51) και (1.52):

$$N_{\mathbf{p}}^{++} = t_{23(\mathbf{p})} t_{12(\mathbf{p})} e^{iq_{2z}h} \left[1 - e^{i2q_{2z}h} r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} \right]^{-1} \quad (2.94)$$

$$N_{\mathbf{p}}^{--} = t_{21(\mathbf{p})} t_{32(\mathbf{p})} e^{iq_{2z}h} \left[1 - e^{i2q_{2z}h} r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} \right]^{-1} \quad (2.95)$$

$$N_{\mathbf{p}}^{-+} = r_{12(\mathbf{p})} + t_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} t_{12(\mathbf{p})} e^{i2q_{2z}h} \left[1 - e^{i2q_{2z}h} r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} \right]^{-1} \quad (2.96)$$

$$N_{\mathbf{p}}^{+-} = r_{32(\mathbf{p})} + t_{23(\mathbf{p})} r_{21(\mathbf{p})} t_{32(\mathbf{p})} e^{i2q_{2z}h} \left[1 - e^{i2q_{2z}h} r_{21(\mathbf{p})} r_{23(\mathbf{p})} \right]^{-1} \quad (2.97)$$



Σχήμα 6: Πίνακες ανάκλασης και διέλευσης για διεπιφάνεια μεταξύ δύο ομοιογενών μέσων, εκφρασμένοι με χρήση των σημείων αναφοράς O_1 και O_2 , σε θέσεις $-\mathbf{d}_l$ και \mathbf{d}_r από το κέντρο της διεπιφάνειας, αντίστοιχα.

όπου $p = 1, 2$ για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα. Οι συντελεστές $r_{jj'(1)}$ και $t_{jj'(1)}$ δίνονται από τις Εξ. (1.49) και (1.50), αντικαθιστώντας τους δείκτες 1, 2 με jj' , ενώ οι συντελεστές $r_{jj'(2)}$ και $t_{jj'(2)}$ από τις Εξ. (1.45) και (1.46).

Για τις σύνθετες δομές που μπορεί να αποτελούνται από συνδιασμούς ομοιογενών πλακιδίων σε συνδιασμό με επίπεδα σχεδιαστών συγκεκριμένης διαστάσεως περιόδου είναι βολικό η παράλληλη συνιστώσα των κυματανυσμάτων να γραφεί ως $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}$, όπως στην Εξ. (2.49). Επιπλέον, εκφράζοντας τα κύματα στα αριστερά του πλακιδίου 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 , τα στοιχεία των πινάκων διέλευσης και ανάκλασης \mathbf{Q} γράφονται:

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} = \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{++}e^{i(\mathbf{K}_{3\mathbf{g}}^+\cdot\mathbf{d}_r+\mathbf{K}_{1\mathbf{g}'}^+\cdot\mathbf{d}_l)} \quad (2.98)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} = \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{+-}e^{i(\mathbf{K}_{3\mathbf{g}}^+\cdot\mathbf{d}_r-\mathbf{K}_{3\mathbf{g}'}^-\cdot\mathbf{d}_r)} \quad (2.99)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} = \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{-+}e^{-i(\mathbf{K}_{1\mathbf{g}}^-\cdot\mathbf{d}_l-\mathbf{K}_{1\mathbf{g}'}^+\cdot\mathbf{d}_l)} \quad (2.100)$$

$$Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} = \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}N_{\mathbf{p}}^{--}e^{-i(\mathbf{K}_{1\mathbf{g}}^-\cdot\mathbf{d}_l+\mathbf{K}_{3\mathbf{g}'}^-\cdot\mathbf{d}_r)} \quad (2.101)$$

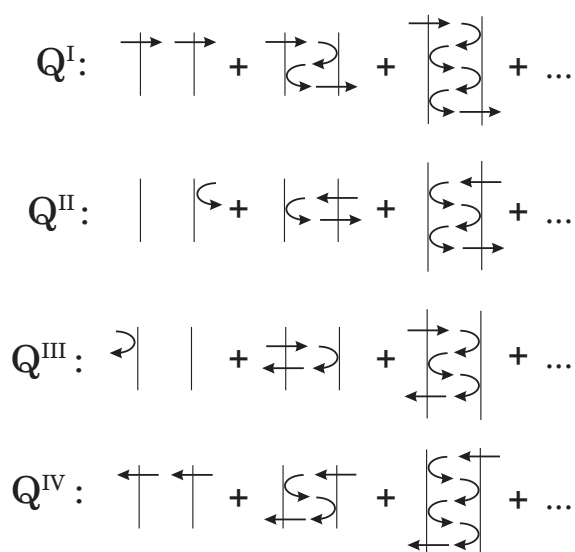
όπου:

$$\mathbf{K}_{j\mathbf{g}}^{\pm} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g} \pm \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon_j \mu_j - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2 \right]^{1/2} \hat{\mathbf{z}} \quad (2.102)$$

Τα αποτελέσματα αυτά ισχύουν και για την ειδική περίπτωση όπου το πλακίδιο εκφυλίζεται σε διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ των δύο διαφορετικών ημιάπειρων μέσων, $j = 1$ και $j = 3$, δηλαδή για $h = 0$ και $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_3 = (0, 0, 0)$.

2.5 Σκέδαση από σύνθετο πλακίδιο

Στις προηγούμενες υποενότητες προσδιορίστηκαν οι πίνακες \mathbf{Q} για την περίπτωση επιπέδου σχεδαστών δισδιάστατης περιοδικότητας και για ομοιογενές πλακίδιο ή επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο μέσων. Οι παραπάνω δομές τοποθετημένες διαδοχικά μπορούν να δημιουργήσουν ένα σύνθετο πλακίδιο, στο οποίο θα αντιστοιχούν καινούριοι πίνακες \mathbf{Q} . Οι πίνακες αυτοί προκύπτουν με κατάλληλο συνδιασμό των επιμέρους πινάκων διέλευσης και ανάκλασης των πεπερασμένων στο πλήθος στοιχείων που δομούν το σύνθετο πλακίδιο. Πρέπει να παρατηρηθεί ότι σε περίπτωση που δύο διαδοχικά επίπεδα βρίσκονται σε διαφορετικά περιβάλλοντα μέσα, η επίπεδη διεπιφάνεια που τα διαχωρίζει θεωρείται επιπλέον στοιχείο που προκαλεί σκέδαση και συνεπώς πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν στον υπολογισμό των πινάκων \mathbf{Q} που αφορούν το σύνθετο πλακίδιο.



Σχήμα 7: Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας πολλαπλής σκέδασης για δύο διαδοχικές δομές.

Έστω δύο διαδοχικά στοιχεία (n) και ($n+1$) με πίνακες $\mathbf{Q}(n)$ και $\mathbf{Q}(n+1)$ που δίνονται από τις Εξ. (2.82)-(2.85) ή (2.98)-(2.101), ανάλογα με τη δομή στην οποία αντιστοιχούν. Τα διανύσματα $-\mathbf{d}_l$ και \mathbf{d}_r για το κάθε στοιχείο μπορούν να επιλεγούν τυχαία με μόνη προϋπόθεση το σημείο ως προς το οποίο αναπτύσσονται τα κύματα μεταξύ των δύο στοιχείων να είναι κοινό, δηλαδή $\mathbf{A}_r(n) = \mathbf{A}_l(n+1)$. Τα κύματα στα αριστερά (δεξιά) του ζεύγους αναπτύσσονται ως προς το σημείο που προσδιορίζεται από το $-\mathbf{d}_l(n)$ ($\mathbf{d}_r(n+1)$) από το κέντρο του n -στοιχείου ($n+1$ -στοιχείου). Λαμβάνοντας υπ' όψιν όλες τις πολλαπλές σκεδάσεις για τον πίνακα \mathbf{Q}^I (Σχ. 7) έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^I(n, n+1) &= \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^I(n) + \mathbf{Q}^I(n+1) [\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)] \mathbf{Q}^I(n) + \\ &\quad + \mathbf{Q}^I(n+1) [\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)] \mathbf{Q}^I(n) + \dots = \\ &= \mathbf{Q}^I(n+1) \left[\mathbf{I} + \mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1) + (\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1))^2 + \dots \right] \mathbf{Q}^I(n) \end{aligned}$$

Αθροίζοντας τη γεωμετρική σειρά, τελικά παίρνουμε:

$$\mathbf{Q}^I(n, n+1) = \mathbf{Q}^I(n+1) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)]^{-1} \mathbf{Q}^I(n) \quad (2.103)$$

Αντίστοιχα για τον πίνακα \mathbf{Q}^{II} , λαμβάνοντας υπ' όψιν όλες τις πολλαπλές σχεδιάσεις:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{II}(n, n+1) &= \mathbf{Q}^{II}(n+1) + \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{IV}(n+1) + \\ &+ \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) [\mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)] \mathbf{Q}^{IV}(n+1) + \\ &+ \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) [\mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)] \mathbf{Q}^{IV}(n+1) + \dots = \\ &= \mathbf{Q}^{II}(n+1) + \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) [\mathbf{I} + \mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) + (\mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n))^2 + \dots] \mathbf{Q}^{IV}(n+1) \end{aligned}$$

και αθροίζοντας τη γεωμετρική σειρά:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{II}(n, n+1) &= \mathbf{Q}^{II}(n+1) + \\ &+ \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)]^{-1} \mathbf{Q}^{IV}(n+1) \end{aligned} \quad (2.104)$$

Όμοια υπολογίζονται και οι πίνακες $\mathbf{Q}^{III}(n, n+1)$ και $\mathbf{Q}^{IV}(n, n+1)$. Συνολικά οι πίνακες \mathbf{Q} γράφονται ως:

$$\mathbf{Q}^I(n, n+1) = \mathbf{Q}^I(n+1) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)]^{-1} \mathbf{Q}^I(n) \quad (2.105)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{II}(n, n+1) &= \mathbf{Q}^{II}(n+1) + \\ &+ \mathbf{Q}^I(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)]^{-1} \mathbf{Q}^{IV}(n+1) \end{aligned} \quad (2.106)$$

$$\mathbf{Q}^{III}(n, n+1) = \mathbf{Q}^{III}(n) + \mathbf{Q}^{IV}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{II}(n)\mathbf{Q}^{III}(n+1)]^{-1} \mathbf{Q}^I(n) \quad (2.107)$$

$$\mathbf{Q}^{IV}(n, n+1) = \mathbf{Q}^{IV}(n) [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{III}(n+1)\mathbf{Q}^{II}(n)]^{-1} \mathbf{Q}^{IV}(n+1) \quad (2.108)$$

Στην περίπτωση που η δομή αποτελείται από τρία στοιχεία, οι συνολικοί πίνακες \mathbf{Q} μπορούν να υπολογιστούν μέσω των Εξ. (2.105)-(2.108) χρησιμοποιώντας τους πίνακες \mathbf{Q} του ζεύγους και τους πίνακες \mathbf{Q} του τρίτου στοιχείου. Με αυτή τη διαδικασία μπορούν να υπολογιστούν οι πίνακες \mathbf{Q} κάθε σύνθετου πλακιδίου που αποτελείται από πεπερασμένο αριθμό στοιχείων.

Αν η πεπερασμένη δομή αποτελείται από την επανάληψη μεγάλου αριθμού πανομοιότυπων σύνθετων μοναδιαίων πλακιδίων, με κατάλληλη επιλογή των πινάκων και μέσω των Εξ. (2.105)-(2.108) μπορούμε να προσδιορίσουμε τους συνολικούς πίνακες \mathbf{Q} , διπλασιάζοντας διαδοχικά το μέγεθος του συστήματος. Για 2^N διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια χρησιμοποιώντας τους πίνακες \mathbf{Q} του μοναδιαίου πλακιδίου μπορούμε να βρούμε τους πίνακες που αντιστοιχούν στο ζεύγος δύο μοναδιαίων πλακιδίων. Στη συνέχεια χρησιμοποιώντας τους πίνακες του ζεύγους μπορούμε με τον ίδιο τρόπο να προσδιορίσουμε τους πίνακες που αντιστοιχούν σε τέσσερα διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια και ούτω καθεξής.

Συμβολίζοντας με δείκτες (L) ή (R) τις ποσότητες που αφορούν τα ημίπειρα μέσα αριστερά και δεξιά του σύνθετου πλακιδίου, αντίστοιχα, ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει από τα αριστερά στο σύνθετο πλακίδιο μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{in}}^+(\mathbf{r}) = [E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+ e^{i\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}'}^+(\mathbf{r}-\mathbf{A}_L)} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{K}_{(L)\mathbf{g}'}^+) \quad (2.109)$$

Αντίστοιχα, το ανακλώμενο και το διερχόμενο από το σύνθετο πλακίδιο κύμα μπορεί να γραφεί με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{\text{rf}}^-(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{gP}} [E_{\text{rf}}^-]_{\mathbf{gP}} e^{i\mathbf{K}_{(\text{L})\mathbf{g}}^-(\mathbf{r}-\mathbf{A}_{\text{L}})} \hat{\mathbf{e}}_{\text{p}}(\mathbf{K}_{(\text{L})\mathbf{g}}^-) \quad (2.110)$$

$$\mathbf{E}_{\text{tr}}^+(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{gP}} [E_{\text{tr}}^+]_{\mathbf{gP}} e^{i\mathbf{K}_{(\text{R})\mathbf{g}}^+(\mathbf{r}-\mathbf{A}_{\text{R}})} \hat{\mathbf{e}}_{\text{p}}(\mathbf{K}_{(\text{R})\mathbf{g}}^+) \quad (2.111)$$

όπου:

$$[E_{\text{rf}}^-]_{\mathbf{gP}} = Q_{\mathbf{gP};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} [E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} \quad (2.112)$$

$$[E_{\text{tr}}^+]_{\mathbf{gP}} = Q_{\mathbf{gP};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} [E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} \quad (2.113)$$

και \mathbf{Q} ο πίνακας που περιγράφει το σύνθετο πλακίδιο, μαζί με τις εξωτερικές επιφάνειες.

Ως συντελεστής διέλευσης \mathcal{T} ορίζεται το πηλίκο της ροής του διερχόμενου κύματος προς τη ροή του προσπίπτοντος κύματος και ως συντελεστής ανακλασης \mathcal{R} ορίζεται το πηλίκο της ροής του ανακλώμενου κύματος προς τη ροή του προσπίπτοντος κύματος. Ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting σε όλο το επίπεδο $x-y$ σε κάθε πλευρά του πλακιδίου και παίρνοντας τη χρονική μέση τιμή για μια περίοδο, $2\pi/\omega$, έχουμε:

$$\mathcal{T} = \frac{\sum_{\mathbf{gP}} [E_{\text{tr}}^+]_{\mathbf{gP}} ([E_{\text{tr}}^+]_{\mathbf{gP}})^* K_{(\text{R})\mathbf{g}z}^+ \mu_{\text{L}}}{[E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} ([E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'})^* K_{(\text{L})\mathbf{g}'z}^+ \mu_{\text{R}}} \quad (2.114)$$

$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{\mathbf{gP}} [E_{\text{rf}}^-]_{\mathbf{gP}} ([E_{\text{rf}}^-]_{\mathbf{gP}})^* K_{(\text{L})\mathbf{g}z}^+}{[E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} ([E_{\text{in}}^+]_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'})^* K_{(\text{L})\mathbf{g}'z}^+} \quad (2.115)$$

Στην περίπτωση που έχουμε απορρόφηση ο αντίστοιχος συντελεστής, από την αρχή διατήρησης της ενέργειας, δίνεται από τη σχέση:

$$\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R} \quad (2.116)$$

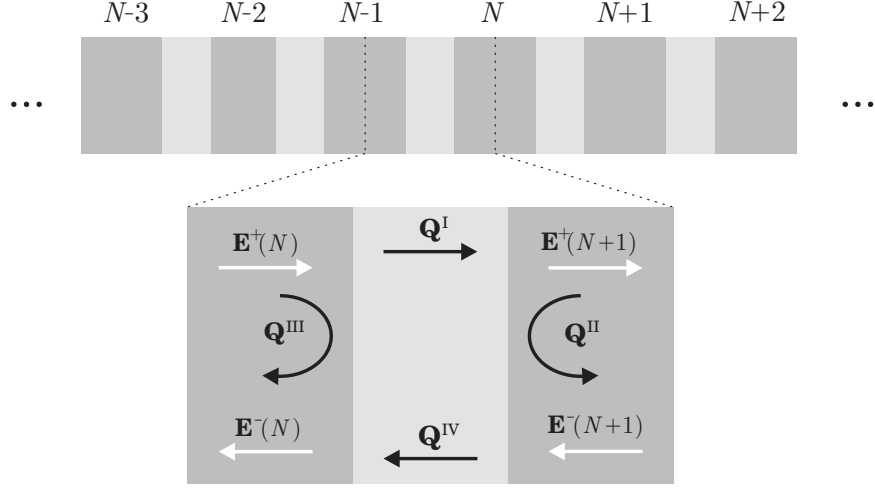
2.6 Φωτονική μιγαδική δομή ζωνών απείρου κρυστάλλου

Το διδιάστατο πλέγμα ενός μοναδιαίου πλακιδίου περιγράφεται από τα ανύσματα:

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (2.117)$$

Στην περίπτωση ενός άπειρου τρισδιάστατου κρυστάλλου που δομείται από διαδοχικά πανομοιότυπα τέτοια μοναδιαία πλακίδια, αν το \mathbf{a}_3 είναι το διάνυσμα που μας μεταφέρει από ένα σημείο του N πλακιδίου σε ένα ισοδύναμο σημείο του $N + 1$ πλακιδίου, τα διανύσματα \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 και \mathbf{a}_3 αποτελούν ένα σύνολο θεμελιωδών διανυσμάτων του τρισδιάστατου κρυστάλλου. Μεταξύ των μοναδιαίων πλακιδίων N και $N + 1$ το πεδίο για δεδομένα \mathbf{k}_{\parallel} και ω έχει τη μορφή:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{gP}} \left[E_{\mathbf{gP}}^+(N) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+(\mathbf{r}-\mathbf{A}_r(N))} \hat{\mathbf{e}}_{\text{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+) + E_{\mathbf{gP}}^-(N) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^-(\mathbf{r}-\mathbf{A}_r(N))} \hat{\mathbf{e}}_{\text{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^-) \right] \quad (2.118)$$



Σχήμα 8: Σχηματική αναπαράσταση των πινάκων \mathbf{Q} και των πεδίων στη θεμελιώδη κυψελίδα άπειρου φωτονικού κρυστάλλου.

με:

$$E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^-(N) = \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N+1) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) \quad (2.119)$$

$$E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+(N+1) = \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N+1) \quad (2.120)$$

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

Η μιγαδική δομή ζωνών που σχετίζεται με την παραπάνω δομή αντιστοιχεί σε λύσεις των εξισώσεων Maxwell που είναι γενικευμένα κύματα Bloch, δεδομένων ω και \mathbf{k}_{\parallel} . Ένα γενικευμένο κύμα Bloch, εξ ορισμού έχει την ιδιότητα:

$$E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^{\pm}(N+1) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^{\pm}(N) \quad (2.121)$$

όπου $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel} + k_z(\omega, \mathbf{k}_{\parallel})\hat{\mathbf{z}}$. Συνεπώς, από την Εξ. (2.121), οι Εξ. (2.119) και (2.120) γράφονται ως:

$$\sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{IV}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N+1) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{III}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^-(N+1) \quad (2.122)$$

και

$$\sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{I}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^+(N) + \sum_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'} Q_{\mathbf{g}\mathbf{p};\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^{\text{II}} E_{\mathbf{g}'\mathbf{p}'}^-(N+1) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} E_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^+(N) \quad (2.123)$$

Δηλαδή προκύπτει το σύστημα:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\text{I}} & \mathbf{Q}^{\text{II}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N+1) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\text{III}} & \mathbf{Q}^{\text{IV}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N+1) \end{pmatrix} \quad (2.124)$$

όπου οι \mathbf{E}^\pm είναι πίνακες στήλες με στοιχεία $E_{\mathbf{g}_1x}^\pm, E_{\mathbf{g}_1y}^\pm, E_{\mathbf{g}_1z}^\pm, E_{\mathbf{g}_2x}^\pm, \dots$. Έχουμε ότι:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\text{III}} & \mathbf{Q}^{\text{IV}} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -[\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{III}} & [\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.125)$$

Επομένως η Εξ. (2.124) γράφεται:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\text{I}} & \mathbf{Q}^{\text{II}} \\ -[\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{III}} \mathbf{Q}^{\text{I}} & [\mathbf{Q}^{\text{IV}}]^{-1} [\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\text{III}} \mathbf{Q}^{\text{II}}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+(N)} \\ \mathbf{E}^{-(N+1)} \end{pmatrix} \quad (2.126)$$

Προκύπτει, δηλαδή, ένα πρόβλημα ιδιοτιμών, η λύση του οποίου προσδιορίζει τις συνιστώσες k_z . Κρατώντας g_{max} στον αριθμό διανύσματα \mathbf{g} , επιλέγοντας εκείνα του μικρότερου πλάτους, τα στοιχεία των \mathbf{E}^\pm είναι $3g_{\text{max}}$ και οι πίνακες \mathbf{Q} είναι πίνακες διαστάσεων $3g_{\text{max}} \times 3g_{\text{max}}$. Επομένως, λύνοντας το πρόβλημα (2.126) προκύπτουν $6g_{\text{max}}$ ιδιοτιμές. Για δεδομένα $\mathbf{k}_\parallel, \omega$ προκύπτει ότι το 1/3 των λύσεων αντιστοιχεί σε ηλεκτρικό πεδίο μη μηδενικής απόκλισης για χώρο χωρίς φορτία και άρα αυτές οι λύσεις απορρίπτονται. Οι υπόλοιπες τιμές k_z που υπολογίζονται από τις ιδιοτιμές $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3}$ για πραγματικό ω και δεδομένο \mathbf{k}_\parallel ορίζουν $4g_{\text{max}}$ καμπύλες διασποράς στο χώρο του μιγαδικού k_z και όλες μαζί συνιστούν τη φωτονική μιγαδική δομή ζωνών του απείρου κρυστάλλου που σχετίζεται με το δεδομένο κρυσταλλογραφικό επίπεδο.

Επειδή οι ιδιοτιμές είναι της μορφής $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3}$, τιμές k_z που διαφέρουν κατά πολλαπλάσιο του $|b_3|$, όπου $b_3 = 2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) / [\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)]$ αντιστοιχούν στην ίδια λύση του προβλήματος (2.126). Επιπλέον όταν υπάρχει επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας που σχετίζεται με την κρυσταλλογραφική επιφάνεια που μελετάται οι λύσεις του προβλήματος (2.126) εμφανίζονται σε ζεύγη, k_z και $-k_z$.

Για δεδομένο \mathbf{k}_\parallel μια καμπύλη διασποράς μπορεί σε κάποιες περιοχές συχνοτήτων να είναι πραγματική, δηλαδή το k_z μπορεί να είναι πραγματικό και για συχνότητες εκτός αυτών των περιοχών να είναι μιγαδική, δηλαδή το k_z να είναι μιγαδικό. Προκύπτει ότι για δεδομένα \mathbf{k}_\parallel και ω από τις $4g_{\text{max}}$ ιδιοτιμές καμία ή ελάχιστες δίνουν πραγματικό $k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$. Οι αντίστοιχες λύσεις κυμάτων Bloch αναπαριστούν διαδιδόμενα κύματα στον συγκεκριμένο άπειρο κρύσταλλο. Οι υπόλοιπες ιδιοτιμές είναι μιγαδικές και αντιστοιχούν σε φθίνοντα κύματα με πλάτος που φθίνει εκθετικά στη θετική ή αρνητική διεύθυνση του z . Τα φθίνοντα αυτά κύματα δεν έχουν φυσική υπόσταση στον άπειρο κρύσταλλο, όμως αποτελούν φυσικές λύσεις του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου στον ημιάπειρο κρύσταλλο, που εκτείνεται από το $z = 0$ έως το $z \rightarrow \infty$, ή σε ομοιογενές πλακίδιο πεπερασμένου πάχους.

Μια περιοχή συχνοτήτων στην οποία δεν υπάρχει διαδιδόμενο κύμα για δεδομένο \mathbf{k}_\parallel συνιστά ένα χάσμα συχνοτήτων για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Αν πάνω από μια συχνότητα δεν υπάρχει κανένα διαδιδόμενο κύμα για οποιοδήποτε \mathbf{k}_\parallel η περιοχή αυτή ονομάζεται απόλυτο χάσμα συχνοτήτων. Το k_z για δεδομένο \mathbf{k}_\parallel συνηθίζεται να παρουσιάζεται κανονικοποιημένο ($2k_z/|b_3|$) σαν συνάρτηση του $\omega a/c$, όπου a η πλεγματική σταθερά του κρυστάλλου και c η ταχύτητα του φωτός στο κενό, καθώς με αυτόν τον τρόπο τα αποτελέσματα είναι εφαρμόσιμα για διαφορετικά εύρη συχνοτήτων του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, υπό την προϋπόθεση ότι το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας του κρυστάλλου είναι επιλεγμένο κατάλληλα.

3 Εφαρμογή για διαδοχικά επίπεδα fcc (111)

Οι συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης πεπερασμένων σύνθετων πλακιδίων, όπως και η φωτονική μιγαδική δομή ζωνών του αντίστοιχου άπειρου κρυστάλλου, μπορούν να προσδιοριστούν υπολογιστικά μέσω της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης που αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα. Το λογισμικό MULTEM^{6,7} υλοποιεί αυτή τη μέθοδο για δομές που αποτελούνται από διαδοχικά επίπεδα περιοδικών διατάξεων σφαιρικών σκεδαστών σε ομοιογενή μέσα, από επίπεδα ομοιογενή πλακίδια ή και από συνδιασμούς τέτοιων δομών. Με χρήση αυτού θα προσδιοριστούν η σχέση διασποράς και οι συντελεστές \mathcal{T} και \mathcal{R} για πλακίδιο που συντίθεται από διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών πολυστυρενίου (PS), που ακολουθούν τη διάταξη επιστοίβασης ABC, σε περιβάλλον αέρα και θα αναλυθούν τα σχετικά αποτελέσματα. Στη συνέχεια θα προσδιοριστούν οι σχέσεις διασποράς για σκεδαστές διαφορετικών διηλεκτρικών σταθερών, που αποκλίνουν όλο και περισσότερο από τη διηλεκτρική σταθερά του αέρα, όπως και για την αντίστροφη δομή διασυνδεδεμένων πόρων σε περιβάλλον διηλεκτρικού.

3.1 Σύντομη περιγραφή του λογισμικού MULTEM

Το λογισμικό MULTEM υπολογίζει, με επιλογή του χρήστη, είτε τους συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης πεπερασμένου πλακιδίου, είτε τη φωτονική μιγαδική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου που αντιστοιχεί στη μοναδιαία δομή που καθορίζεται στην είσοδο. Ο χρήστης, επιπλέον, προσδιορίζει την κατεύθυνση και την πόλωση του προσπίπτοντος κύματος, την παρουσία ή όχι μέσου εμβάπτισης και ορίζει τα θεμελιώδη ανύσματα του διαστάτου πλέγματος στο επίπεδο $x-y$. Το μήκος, a , του πρώτου θεμελιώδους ανύσματος στην κατεύθυνση x χρησιμοποιείται ως μονάδα μήκους για όλα τα σχετικά μεγέθη. Ως προς τη δομή του προς μελέτη σύνθετου πλακιδίου πρέπει να καθοριστεί ο αριθμός των επιμέρους στοιχείων που αποτελούν τη δομική μονάδα του πλακιδίου, όπως και ο αριθμός των δομικών αυτών μονάδων στο σύνθετο πλακίδιο.

Στη συνέχεια, για όλα τα δομικά στοιχεία, ανάλογα με το αν είναι ομοιογενή πλακίδια ή επίπεδα περιοδικών διατάξεων σφαιρικών σωματιδίων, πρέπει να προσδιοριστούν τα βασικά χαρακτηριστικά τους. Συγκεκριμένα, στην πρώτη περίπτωση ο χρήστης καθορίζει το πάχος του πλακιδίου, τις τιμές της μαγνητικής διαπερατότητας και της διηλεκτρικής συνάρτησης του υλικού του πλακιδίου και των δύο μέσων που βρίσκονται στα αριστερά και στα δεξιά του, όπως και τα τρισδιάστατα διανύσματα θέσης για τα σημεία αναφοράς που χρησιμοποιούνται για τα κύματα αριστερά και δεξιά του πλακιδίου, $\mathbf{d}_l, \mathbf{d}_r$, με φορά από αριστερά προς τα δεξιά.

Στην περίπτωση περιοδικής διάταξης σφαιρικών σωματιδίων πρέπει να προσδιοριστούν οι τιμές της μαγνητικής διαπερατότητας και της διηλεκτρικής συνάρτησης του ομοιογενούς υλικού στο οποίο είναι εμβαπτισμένα αυτά, ο αριθμός μη θεμελιωδών επιπέδων που αποτελούν τη μονάδα της δομής και ο αριθμός που αυτή η μονάδα επαναλαμβάνεται σε αυτό το δομικό στοιχείο. Τέλος, για κάθε μη θεμελιώδες επίπεδο χρειάζεται ο καθορισμός της ακτίνας των σφαιρών, οι τιμές της μαγνητικής διαπερατότητας και της διηλεκτρικής συνάρτησης του υλικού των σφαιρών, τα αντίστοιχα διανύσματα $\mathbf{d}_l, \mathbf{d}_r$ και το διάνυσμα \mathbf{a}_3 που δίνει τη θεμελιώδη μετατόπιση της δομικής μονάδας.

Το εύρος συχνοτήτων ή μηκών κύματος στο κενό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας για τα οποία θα τρέξει το πρόγραμμα δίνεται σε μονάδες ω/c και λ/α αντίστοιχα, ενώ επιλέγεται και ο αριθμός ισαπέχοντων σημείων που θα υπολογίσει το πρόγραμμα σε αυτό το διάστημα. Τέλος,

ο χρήστης επιλέγει τον αριθμό των όρων που το πρόγραμμα θα υπολογίσει στα αναπτύγματα σε σφαιρικά κύματα, l_{\max} , και το μέγιστο μήκος των ανυσμάτων αντιστρόφου πλέγματος, g_{\max} , που θα χρησιμοποιηθεί στην ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα.

Αφού διαβαστεί η είσοδος, το πρόγραμμα προχωράει στον υπολογισμό των θεμελιωδών ανυσμάτων του αντιστρόφου πλέγματος και των ανυσμάτων \mathbf{g} μήκους μικρότερου από αυτού που δόθηκε στην είσοδο, όπως και στον προσδιορισμό των $[E_{\text{in}}]_{\mathbf{g}p}^+$ για το προσπίπτον κύμα. Ακολούθως, προσδιορίζονται τα όρια της επιφανειακής ζώνης Brillouin και με διαδοχικές αφαιρέσεις των ανυσμάτων \mathbf{g}' από το \mathbf{q}_{\parallel} υπολογίζεται το $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{g}'$ εντός αυτής. Στη συνέχεια, αρχίζουν οι επαναλήψεις για τις τιμές συχνότητας που επιλέχθηκαν και ανάλογα με το τι ορίστηκε στην είσοδο υπολογίζονται είτε οι συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης, είτε η φωτονική μιγαδική δομή ζωνών.

Στην πρώτη περίπτωση, για κάθε επιμέρους δομικό στοιχείο του σύνθετου πλακιδίου προσδιορίζονται οι πίνακες \mathbf{Q} . Στην περίπτωση ομοιογενούς πλακιδίου ή διεπιφάνειας χρησιμοποιούνται οι Εξ. (2.98)-(2.101). Στην περίπτωση περιοδικής δομής σφαιρών οι πίνακες \mathbf{Q} υπολογίζονται από τις Εξ. (2.82)-(2.85). Αρχικά προσδιορίζονται τα στοιχεία πίνακα $Z_{\ell m}^{\ell' m'}(q, \mathbf{k}_{\parallel})$, μέσω των Εξ. (2.56), (2.24) και (2.25), και από αυτά προσδιορίζονται τα στοιχεία $\Omega_{P\ell m; P'\ell' m'}(\mathbf{k}_{\parallel})$ από τις Εξ. (2.57) και (2.58). Επιπλέον, υπολογίζονται τα στοιχεία $T_{E\ell}$ και $T_{H\ell}$ από τις Εξ. (2.19) και (2.20), όπως και τα στοιχεία $A_{P\ell m}^0(\mathbf{K}_{\mathbf{g}'})$ από τις Εξ. (1.92) και (1.93). Οι τιμές αυτές καταχωρούνται σε πίνακες και με χρήση κατάλληλων υπορουτίνων λύνονται τα υποσυστήματα (2.67) και (2.68) για τον προσδιορισμό των στοιχείων $B_{L;P'}^+$. Υπολογίζοντας, επιπλέον, τα $\Delta_{P\ell m}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s)$ από τις Εξ. (2.72) και (2.73) μπορούν πλέον να προσδιοριστούν τα στοιχεία $S_{\mathbf{g}p; \mathbf{g}'p'}^{s+}$ μέσω της Εξ. (2.78). Με βάση την Εξ. (2.79) μπορούν στη συνέχεια να υπολογιστούν τα στοιχεία $S_{\mathbf{g}p; \mathbf{g}'p'}^{s-}$ και πολλαπλασιάζοντας με τις κατάλληλες φάσεις από τις Εξ. (2.82)-(2.85) υπολογίζονται οι πίνακες \mathbf{Q} . Τέλος, οι συντελεστές \mathcal{T} , \mathcal{R} και \mathcal{A} υπολογίζονται από τις Εξ. (2.114)-(2.116), μέσω των πινάκων \mathbf{Q}^I και \mathbf{Q}^{III} και των Εξ. (2.112) και (2.113).

Με τη διαδικασία που περιγράφηκε υπολογίζονται οι πίνακες \mathbf{Q} για ένα επίπεδο σφαιρών. Για ένα δομικό στοιχείο από διαδοχικά επίπεδα περιοδικών διατάξεων σφαιρικών σωματιδίων υπολογίζονται αρχικά οι πίνακες για το πρώτο και το δεύτερο μη θεμελιώδες επίπεδο, $\mathbf{Q}(1)$ και $\mathbf{Q}(2)$, και μετά οι πίνακες του ζεύγους αυτών, $\mathbf{Q}(1, 2)$, όπως περιγράφηκε στην Ενότητα 2.5. Το ζεύγος αυτό αντιμετωπίζεται πλέον ως ένα στοιχείο και έπειτα από τον υπολογισμό των πινάκων $\mathbf{Q}(3)$ του επόμενου επιπέδου επαναλαμβάνεται η διαδικασία για τον υπολογισμό των πινάκων $\mathbf{Q}(1, 2, 3)$. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για όλα τα μη θεμελιώδη επίπεδα και στη συνέχεια για όλες τις επαναλήψεις της θεμελιώδους αυτής μονάδας στη δομή.

Στην περίπτωση που ο χρήστης ζητήσει την εύρεση της φωτονικής μιγαδικής δομής ζωνών του απείρου χυστάλλου το πρόγραμμα λύνει το πρόβλημα ιδιοτιμών (2.126). Υπολογίζονται έτσι οι g_{\max} ιδιοτιμές και προσδιορίζονται τα k_z που αντιστοιχούν σε διερχόμενα κύματα και σε μη μηδενική απόκλιση του ηλεκτρικού πεδίου. Σε περίπτωση που δεν υπάρχουν πραγματικά k_z εκτυπώνονται οι αντίστοιχες φανταστικές τιμές.

3.2 Αποτελέσματα για διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σκεδαστών πολυστυρενίου

Με χρήση του λογισμικού MULTEM προσδιορίστηκαν η μιγαδική δομή ζωνών και οι συντελεστές διέλευσης, \mathcal{T} , και ανάκλασης, \mathcal{R} , για δομή αποτελούμενη από διαδοχικά επίπεδα fcc (111), διάταξης επιστοίβασης ABC, σφαιρών πολυστυρενίου (PS) σχετικής διηλεκτρικής

σταθεράς $\epsilon = 2.56$, στο κενό, για κάθετη πρόσπτωση ηλεκτρομαγνητικού κύματος.

Τα θεμελιώδη ανύσματα του δισδιάστατου πλέγματος στο επίπεδο $x-y$ είναι:

$$\mathbf{a}_1 = \alpha(1, 0, 0) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = \alpha \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right) \quad (3.2)$$

και το άνυσμα της θεμελιώδους μετατόπισης του επιπέδου είναι:

$$\mathbf{a}_3 = \alpha \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{3} \right) \quad (3.3)$$

Κατά συνέπεια το διάνυσμα \mathbf{b}_3 ισούται με:

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi \sqrt{3}}{\alpha \sqrt{2}} \hat{\mathbf{z}} \quad (3.4)$$

Επιλέχτηκε ακτίνα σφαιρών ίση με $\alpha/2$, δηλαδή δομή συντελεστή κατάληψης $f = 0.74$, στην οποία οι σφαίρες του ίδιου επιπέδου $x-y$ και οι σφαίρες διαδοχικών επιπέδων εφάπτονται.

Τα αποτελέσματα για τιμές συχνοτήτων $\omega\alpha/c$ από 0 έως 5.5 και για 8 διαδοχικά επίπεδα παρουσιάζονται στο Σχ. 9 και στο Σχ. 10. Γίνεται άμεσα εμφανής η ομοιότητα της δομής ζωνών που προκύπτει για τη διάδοση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας δια μέσου δομής με περιοδικές εναλλαγές της διηλεκτρικής σταθεράς και άρα του δείκτη διάθλασης, με τη σχέση διασποράς για ηλεκτρόνια εντός κρυσταλλικού περιοδικού δυναμικού, με την εμφάνιση απαγορευμένης περιοχής συχνοτήτων και πολλαπλών υποζωνών για μεγαλύτερες συχνότητες.

Στην περιοχή συχνοτήτων $\omega\alpha/c$ από 0 έως περίπου 5 παρατηρούμε ότι η σχέση διασποράς έχει γραμμική συμπεριφορά με ελαφρά καμπύλωση στα όρια της πρώτης ζώνης Brillouin, όπου εμφανίζεται το χάσμα συχνοτήτων στην περιοχή 2.603-2.768, εύρους 0.165. Η γραμμική συμπεριφορά είναι αυτή που αναμένεται στην περίπτωση ομοιογενούς μέσου, δείκτη διάθλασης n , όπου:

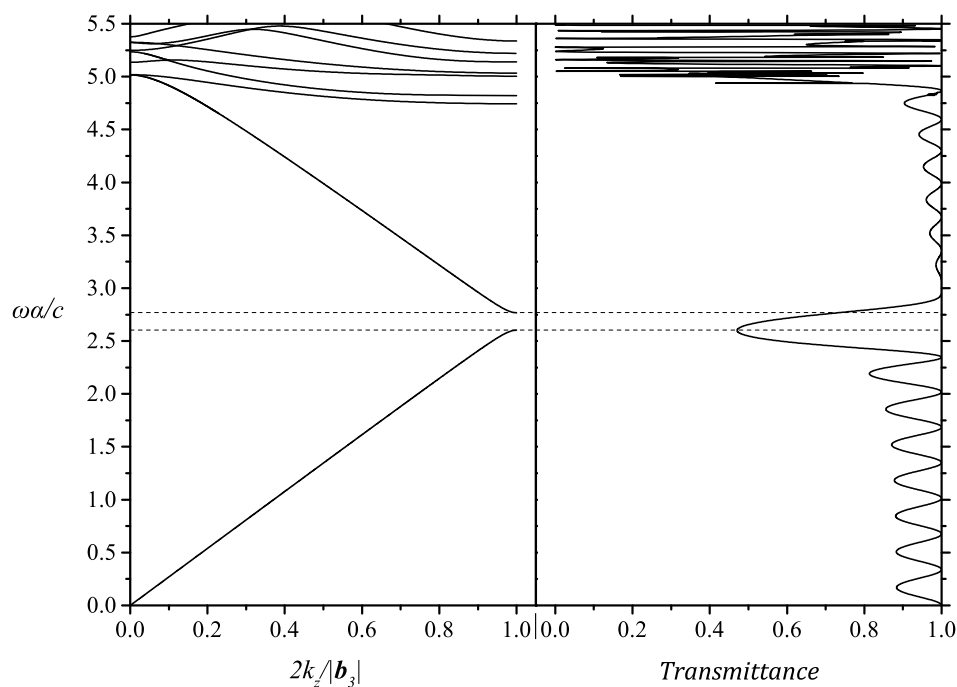
$$\omega = \frac{c}{n}k \quad (3.5)$$

Η ομοιότητα αυτή με τη μιγαδική δομή ζωνών του Σχ. 9 είναι λογική για μικρές συχνότητες, δηλαδή για μεγάλα μήκη κύματος συγκριτικά με την περιodicότητα με την οποία εναλλάσσεται η διηλεκτρική σταθερά, όπου κατά συνέπεια η ανομοιογένεια δε γίνεται αντιληπτή. Ο εκφυλισμός που παρουσιάζεται στη σχέση διασποράς που περιγράφεται από την Εξ. (3.5) στο όριο της πρώτης ζώνης Brillouin στην περίπτωση του πλακιδίου που επιλέχθηκε αίρεται λόγω των σκεδάσεων Bragg από τα επίπεδα της δομής.

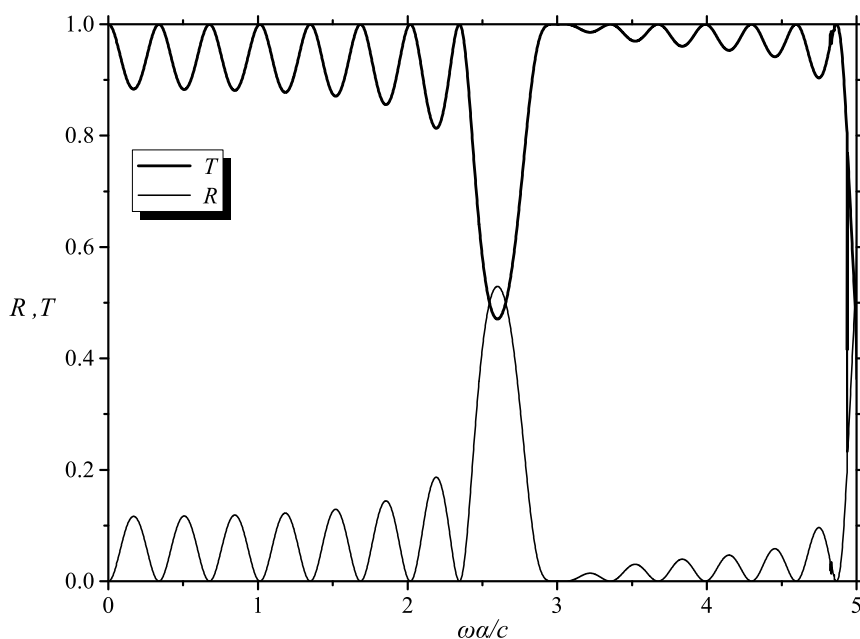
Η ενεργός διηλεκτρική σταθερά, $\bar{\epsilon}$, για μεγάλα μήκη κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας και για συντελεστές κατάληψης μικρότερους από 0.5 βρίσκειται από τη σχέση Maxwell Garnett:

$$\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_{\text{void}}}{\bar{\epsilon} + 2\epsilon_{\text{void}}} = f \frac{\epsilon_{\text{sph}} - \epsilon_{\text{void}}}{\epsilon_{\text{sph}} + 2\epsilon_{\text{void}}} \quad (3.6)$$

όπου f ο συντελεστής κατάληψης και ϵ_{sph} και ϵ_{void} οι διηλεκτρικές σταθερές του υλικού των σφαιρών και του περιβάλλοντος μέσου, αντίστοιχα. Καθώς όμως ο συντελεστής κατάληψης



Σχήμα 9: Μιγαδική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση [111] πλέγματος fcc σφαιρών πολυστυρενίου (PS) σε κενό και συντελεστής διέλευσης, \mathcal{T} , σαν συνάρτηση της συχνότητας για πεπερασμένο πλακίδιο αποτελούμενο από 8 διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών PS σε περιβάλλον κενού. Με διακεκομμένη γραμμή σημειώνονται τα όρια του χάσματος συχνοτήτων.



Σχήμα 10: Κοινό διάγραμμα των συντελεστών διέλευσης, \mathcal{T} , και ανάκλασης, \mathcal{R} , σαν συνάρτηση της συχνότητας, για πεπερασμένο πλακίδιο αποτελούμενο από 8 διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών PS σε περιβάλλον αέρα.

είναι $f = 0.74$ η παραπάνω σχέση δεν είναι ακριβής¹¹. Σε αυτήν την περίπτωση, για διάδοση του πεδίου κατά τον άξονα z , δηλαδή για ηλεκτρικό πεδίο παράλληλο στο επίπεδο $x-y$ των πλακιδίων, η τιμή της ενεργούς διηλεκτρικής σταθεράς μπορεί να εκτιμηθεί από τη μέση τιμή των διηλεκτρικών σταθερών στη δομή, δηλαδή μέσω της σχέσης:

$$\bar{\epsilon} = f\epsilon_{\text{sph}} + (1 - f)\epsilon_{\text{void}} \quad (3.7)$$

Έχουμε $\epsilon_{\text{void}} = 1$ και $\epsilon_{\text{sph}} = 2.56$. Επομένως, από την Εξ. (3.7) βρίσκουμε ότι η δομή για μεγάλα μήκη κύματος συμπεριφέρεται σαν ομοιογενές πλακίδιο διηλεκτρικής σταθεράς $\bar{\epsilon} = 2.1544$, που αντιστοιχεί σε δείκτη διάθλασης $n_{\text{eff}} = 1.468$.

Με γραμμική προσαρμογή της σχέσης διασποράς του Σχ. 9 για την περιοχή συχνοτήτων από 0 έως 2.5 παίρνουμε τέλεια εφαρμογή με κλίση, $\kappa = 2.6565$. Έχουμε:

$$\frac{\omega\alpha}{c} = \kappa k_z \frac{\alpha\sqrt{2}}{\pi\sqrt{3}} \Rightarrow \quad (3.8)$$

$$\omega = c k_z \frac{\kappa\sqrt{2}}{\pi\sqrt{3}} \quad (3.9)$$

Επομένως συγκρίνοντας με την Εξ. (3.5) βρίσκουμε ότι για αυτές τις τιμές συχνοτήτων η δομή συμπεριφέρεται σαν να ήταν ομοιογενής με ενεργό δείκτη διάθλασης:

$$n_{\text{eff}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{\kappa\sqrt{2}} \approx 1.448 \quad (3.10)$$

στον οποίο αντιστοιχεί τιμή διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon_{\text{eff}} = n_{\text{eff}}^2 = 2.098$, τιμή κοντά στην μέση τιμή που προσδιορίστηκε προηγουμένως.

Από το Σχ. 10 παρατηρούμε ότι οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης ικανοποιούν τη σχέση: $T + R = 1$, δηλαδή έχουμε μηδενική απορρόφηση όπως ήταν αναμενόμενο για υλικό με πραγματική διηλεκτρική σταθερά. Οι δύο συντελεστές παρουσιάζουν ταλαντωτική συμπεριφορά στις γραμμικές περιοχές της σχέσης διασποράς με το συντελεστή T να κυμαίνεται μεταξύ 85-100%. Στην περιοχή των απαγορευμένων συχνοτήτων για μια άπειρη δομή αναμένουμε ο συντελεστής διέλευσης να είναι μηδενικός και ο συντελεστής ανάκλασης να γίνεται μονάδα. Στο Σχ. 9 παρουσιάζεται μια απότομη κορυφή για συχνότητες ελαφρά μετατοπισμένες προς μικρότερες τιμές από αυτές που αντιστοιχούν στο χάσμα. Η κορυφή αυτή αντιστοιχεί σε σημαντική πτώση του συντελεστή διέλευσης με τοπικό ελάχιστο 47.06%, συνοδευόμενη από σημαντική αύξηση του συντελεστή ανάκλασης έως την τιμή 52.94%. Η διαφορά αυτή τόσο ως προς τις τιμές των συντελεστών όσο και ως προς τη θέση της κορυφής από την αναμενόμενη από τη μιγαδική δομή ζωνών εικόνα οφείλεται στο ότι η προς μελέτη δομή είναι πεπερασμένη στην κατεύθυνση z .

Από τη μιγαδική δομή ζωνών γίνεται, επιπλέον, εμφανές ότι για συχνότητες κοντά στα όρια του χάσματος η κλίση $d\omega/dk$ τείνει στο μηδέν. Συμπεραίνουμε, επομένως, ότι στην περιοχή αυτή η ταχύτητα ομάδας των φωτονίων, v_g , ελαττώνεται σημαντικά και επομένως αναμένουμε την παρατήρηση του φαινομένου αργού φωτός για αυτές τις συχνότητες.

Στην περιοχή συχνοτήτων όπου το $\omega\alpha/c$ είναι μεγαλύτερο του 5 η μιγαδική δομή ζωνών αποτελείται από πολλές υποζώνες χωρίς την εμφάνιση απόλυτων χασμάτων. Οι ζώνες αυτές προκύπτουν από κυματανύσματα αρχικά σε άλλες διευθύνσεις που ανάγονται τελικά, βάση της συμμετρίας, στη διεύθυνση z και αντιστοιχούν σε ανώτερης τάξης σχεδιάσεις. Σε αυτή την

περιοχή συχνοτήτων ο συντελεστής T παρουσιάζει απότομες αυξομειώσεις από μοναδιαία έως μηδενική τιμή.

Όπως παρατηρήθηκε προηγουμένως η δομή των 8 διαδοχικών επιπέδων αν και φαίνεται να χαρακτηρίζεται από συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης που ανταποκρίνονται ποιοτικά στη μορφή που υπαγορεύει η μιγαδική δομή ζωνών για άπειρο πλέγμα fcc κατά τη διεύθυνση [111], λόγω της περατότητάς της παρουσιάζει ορισμένες αποκλίσεις. Προκύπτει επομένως το ερώτημα από ποιο μέγεθος και μετά τα οπτικά χαρακτηριστικά της δομής συμφωνούν πλήρως με τη συμπεριφορά του άπειρου κρυστάλλου. Στο Σχ. 11 παρουσιάζονται οι συντελεστές διέλευσης για δομή όμοια με την προηγούμενη, σαν συνάρτηση της συχνότητας, για το διάστημα συχνοτήτων, $\omega a/c$ από 0 έως 5, για διαφορετικούς αριθμούς επιπέδων.

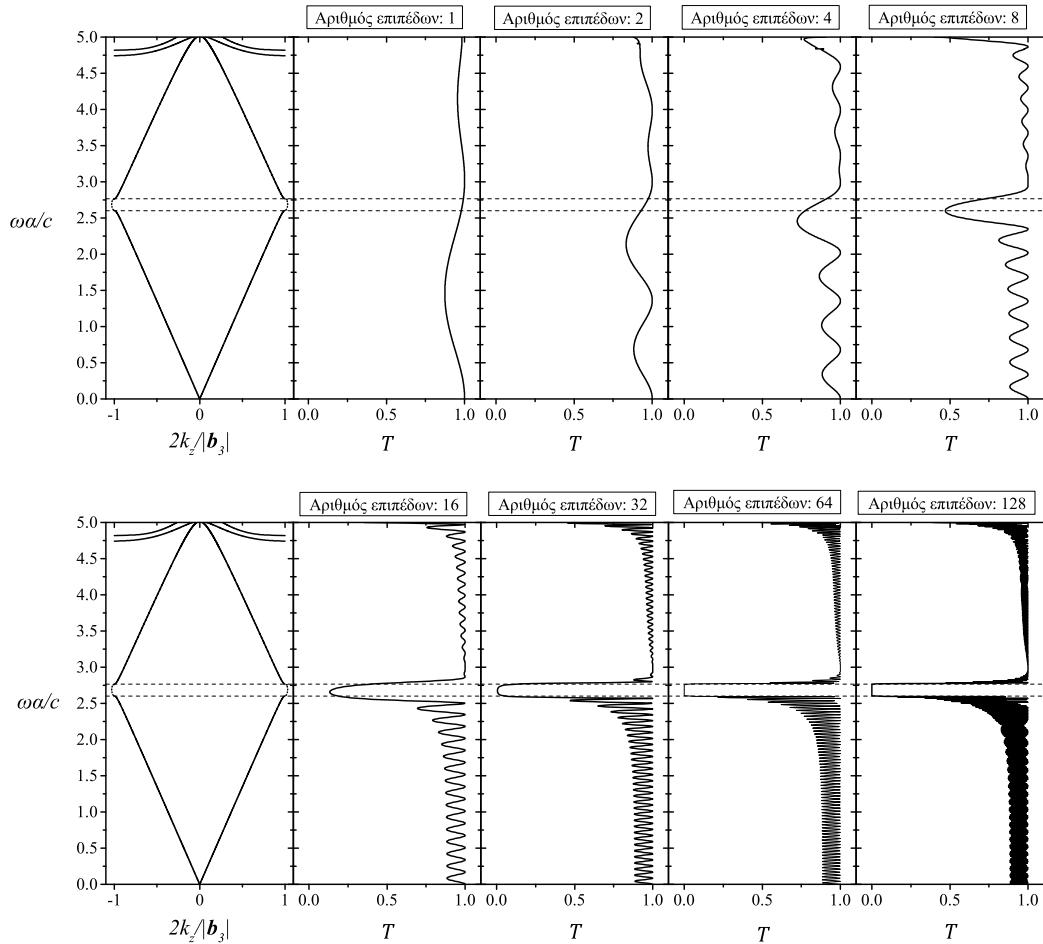
Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση ενός και δύο επιπέδων ο συντελεστής διέλευσης όπως ήταν αναμενόμενο δεν φαίνεται να συμφωνεί με τη μιγαδική δομή ζωνών του άπειρου κρυστάλλου. Από την περίπτωση των τεσσάρων επιπέδων και για περισσότερα επίπεδα παίρνουμε ποιοτικά την εικόνα που παρατηρήθηκε και στο Σχ. 9. Όσο ο αριθμός των επιπέδων αυξάνεται η κορυφή που αντιστοιχεί στην ελάχιστη διέλευση στενεύει και πλησιάζει όλο και περισσότερο το διάστημα των απαγορευμένων συχνοτήτων, ενώ το ύψος της σταδιακά αυξάνεται. Για 32 επίπεδα τα όρια της κορυφής ταιριάζουν απόλυτα με τα όρια του χάσματος, ο συντελεστής διέλευσης σε αυτήν την περιοχή είναι σχεδόν μηδενικός, ενώ γύρω από την κορυφή αυξάνεται απότομα σε τιμές που κυμαίνονται από 80 έως 100%. Για περισσότερα επίπεδα η κεντρική αυτή κορυφή παραμένει αμετάβλητη. Στα διαστήματα που η σχέση διασποράς παρουσιάζει γραμμική συμπεριφορά ο συντελεστής διέλευσης εξακολουθεί να παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά. Όσο ο αριθμός επιπέδων αυξάνεται οι κορυφές των ταλαντώσεων αυτών πληθαίνουν, στενεύουν και πλησιάζουν.

Στις περιοχές των απαγορευμένων συχνοτήτων το k_z παίρνει μιγαδικές τιμές. Κατά συνέπεια το προσπίπτον κύμα αποσβάνει καθώς διαδίδεται στο εσωτερικό του πλακιδίου, με αποτέλεσμα όταν το πάχος των δειγμάτων είναι μικρό, δηλαδή όταν ο αριθμός των επιπέδων που αποτελούν τη δομή είναι μικρός, ο συντελεστής διέλευσης να μην μηδενίζεται. Όταν όμως το πάχος της δομής είναι μεγαλύτερο από τη μέγιστη απόσταση που μπορεί να διεισδύσει το προσπίπτον κύμα ο συντελεστής διέλευσης παίρνει την τιμή μηδέν που αναμέναμε από την εικόνα του άπειρου κρυστάλλου. Όπως φαίνεται και στο Σχ. 11 το εύρος και η μορφή της κορυφής που αντιστοιχεί στις συχνότητες του χάσματος δεν μεταβάλλεται από ένα πάχος και μετά. Αυτό είναι λογικό γιατί η εισερχόμενη ακτινοβολία θα αλληλεπιδρά μόνο με τα πρώτα επίπεδα του πλέγματος μέχρι το μέγιστο βάθος που θα μπορεί να διεισδύσει και έτσι όταν το πάχος ξεπεράσει αυτό το μήκος τα επιπλέον επίπεδα δε θα αλληλεπιδρούν με την ακτινοβολία και άρα δεν αναμένουμε μεταβολή της μορφής της κορυφής.

Το πλάτος του ηλεκτρικού κύματος που ταξιδεύει μέσα στον κρύσταλλο με συχνότητα εντός του χάσματος, αφού το k_z είναι μιγαδικό, θα είναι ανάλογο του $e^{ik_z z} = e^{i\text{Re}[k_z]z} e^{-\text{Im}[k_z]z}$. Επειδή ο συντελεστής διέλευσης είναι ανάλογος του λόγου των τετραγώνων των μέτρων των πλατών του διερχόμενου προς το προσπίπτον κύμα, προκύπτει ότι:

$$T \propto \frac{|e^{-\text{Im}[k_z]d}|^2}{|e^{-\text{Im}[k_z]0}|^2} = Ae^{-2\text{Im}[k_z]d} \quad (3.11)$$

όπου d το συνολικό πάχος του κρυστάλλου και A η σταθερά αναλογίας. Λογαριθμίζοντας την



Σχήμα 11: Μιγαδική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση $[111]$ πλέγματος fcc σφαιρών PS σε κενό και συντελεστές διέλευσης, T , σαν συνάρτηση της συχνότητας για πεπερασμένο πλακίδιο αποτελούμενο από διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών PS σε περιβάλλον κενού. Ο συντελεστής T απεικονίζεται για διαφορετικούς αριθμούς επιπέδων. Στην περιοχή του χάσματος έχει σημειωθεί το φανταστικό μέρος των κυματανυσμάτων και με διακεκομμένη γραμμή σηματοδοτούνται τα όρια του χάσματος.

Εξ. (3.11) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{T} &= \ln A - 2\text{Im}[k_z]d \Rightarrow \\ -\ln \mathcal{T} &= C + 2\text{Im}[k_z]d \end{aligned} \quad (3.12)$$

Το πάχος του κρυστάλλου για N επίπεδα θα δίνεται από τη σχέση:

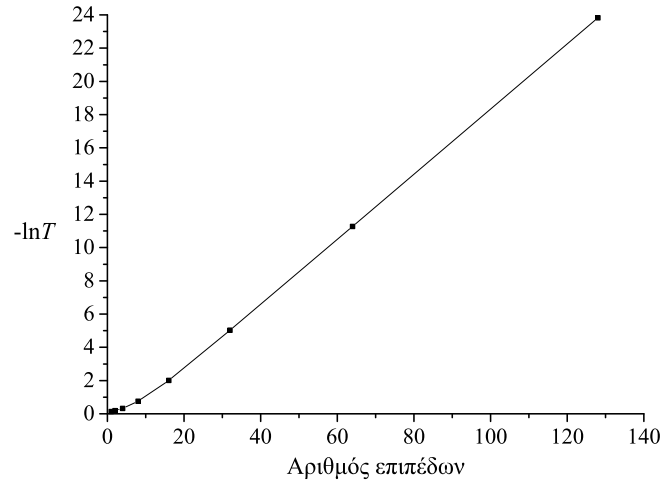
$$d = N d_{111} = N\alpha\sqrt{\frac{2}{3}} \quad (3.13)$$

Επομένως, από την Εξ. (3.12)

$$-\ln \mathcal{T} = C + 2\sqrt{\frac{2}{3}}\text{Im}[k_z]\alpha N \Rightarrow \quad (3.14)$$

$$-\ln \mathcal{T} = C + 2\pi \left(\frac{2\text{Im}[k_z]}{|\mathbf{b}_3|} \right) N \quad (3.15)$$

Δηλαδή έχουμε μια γραμμική σχέση μεταξύ του λογαρίθμου του συντελεστή διέλευσης και του αριθμού των επιπέδων της δομής, από την οποία μπορεί να προσδιοριστεί το φανταστικό μέρος του k_z για τις περιοχές συχνοτήτων του χάσματος.



Σχήμα 12: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου του συντελεστή διέλευσης, $-\ln(\mathcal{T})$, για συχνότητα $\omega\alpha/c = 2.683146$, για πεπερασμένο πλακίδιο αποτελούμενο από διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών PS σε περιβάλλον κενού, σαν συνάρτηση του αριθμού των επιπέδων στο πλακίδιο.

Στο Σχ. 12 παρουσιάζεται το $-\ln \mathcal{T}$ για συχνότητα $\omega\alpha/c = 2.683146$ σαν συνάρτηση του αριθμού επιπέδων. Για μεγάλο αριθμό επιπέδων η καμπύλη γίνεται ευθεία, ενώ για πλακίδια με λιγότερα από περίπου 10 επίπεδα, όπου η συμπεριφορά του πλακιδίου αποκλίνει ακόμα από αυτή της άπειρης δομής, δεν έχουμε γραμμική συμπεριφορά. Η κλίση της ευθείας, K , με κατάλληλη προσαρμογή βρίσκεται ίση με 0.19593. Συνεπώς, συμπεραίνουμε πως το κύμα για να μειωθεί

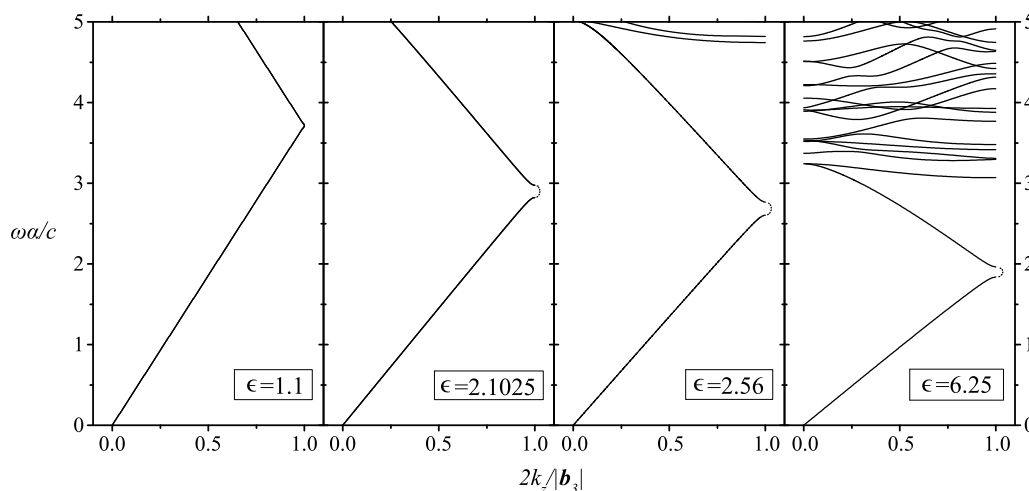
κατά έναν παράγοντα ϵ πρέπει να διανύσει περίπου 5 επίπεδα της δομής και για να μηδενιστεί σχεδόν πλήρως αρκούν περίπου 25 επίπεδα. Από την τιμή της κλίσης μπορεί να υπολογιστεί το κανονικοποιημένο φανταστικό μέρος του k_z :

$$\frac{2\text{Im}[k_z]}{|\mathbf{b}_3|} = \frac{K}{2\pi} \approx 0.03118 \quad (3.16)$$

τιμή που συμφωνεί με τα αποτελέσματα του προγράμματος. Με αντίστοιχη διαδικασία μπορούν να υπολογιστούν τα φανταστικά μέρη του k_z για την περιοχή συχνοτήτων του χάσματος.

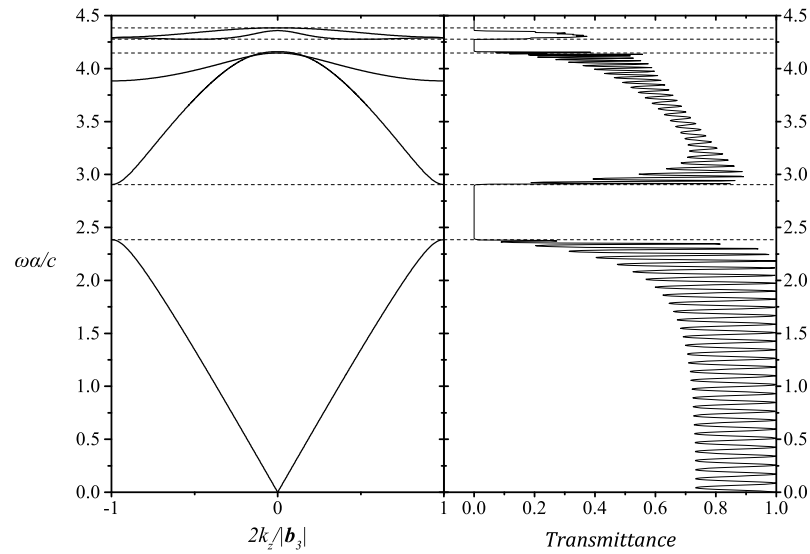
3.3 Επίδραση της αντίθεσης των διηλεκτρικών σταθερών

Στην προηγούμενη ενότητα μελετήθηκε η μιγαδική δομή ζωνών για διαδοχικά επίπεδα σφαιρών PS. Στη συνέχεια θα προσδιοριστεί η σχέση διασποράς για την ίδια δομή αλλά για σκεδαστές διαφορετικών υλικών. Επιλέχθηκαν υλικά των οποίων οι διηλεκτρικές σταθερές διαφέρουν όλο και περισσότερο από αυτή του περιβάλλοντος μέσου, συγκεκριμένα υλικό με $\epsilon = 1.1$, PMMA διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon = 2.1025$ και TiO_2 με διηλεκτρική σταθερά $\epsilon = 6.25$. Οι αντίστοιχες σχέσεις διασποράς απεικονίζονται στο Σχ. 13, μαζί με τη σχέση διασποράς του PS για άμεση σύγκριση.



Σχήμα 13: Μιγαδική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση [111] πλέγματος fcc σφαιρών σε κενό, για σκεδαστές τεσσάρων διαφορετικών υλικών. Από αριστερά προς τα δεξιά: υλικό διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon = 1.1$, PMMA με $\epsilon = 2.1025$, PS με $\epsilon = 2.56$ και TiO_2 με $\epsilon = 6.25$. Με διακεκομμένη γραμμή σημειώνονται σε κάθε περίπτωση οι μιγαδικές τιμές του κυματανύσματος στην περιοχή των χασμάτων συχνότητας.

Παρατηρούμε ότι η μιγαδική δομή ζωνών στην περίπτωση του υλικού διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon = 1.1$ είναι όμοια με αυτή που θα αναμέναμε για ομοιογενές μέσο. Όσο η διαφορά μεταξύ των διηλεκτρικών σταθερών του περιβάλλοντος μέσου και του υλικού των σφαιρών μεγαλώνει η κλίση στην γραμμική περιοχή μειώνεται και άρα ο ενεργός δείκτης διάθλασης αυξάνεται. Το χάσμα μετατοπίζεται προς χαμηλότερες τιμές και οι ανώτερες ζώνες εμφανίζονται, αντίστοιχα, σε χαμηλότερες συχνότητες. Με κατάλληλη επιλογή υλικού, επομένως, η θέση του χάσματος



Σχήμα 14: Μιγαδική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση $[111]$ πλέγματος fcc, $f = 0.74$, σφαιρών TiO_2 σε κενό και συντελεστής διέλευσης, T , σαν συνάρτηση της συχνότητας για πεπερασμένο πλακίδιο αποτελούμενο από 32 διαδοχικά επίπεδα fcc (111) σφαιρών TiO_2 σε περιβάλλον κενού. Με διακεκομμένη γραμμή σημειώνονται τα όρια των χασμάτων συχνοτήτων.

μπορεί να επιλεγεί να βρίσκεται εκεί που είναι επιθυμητό, ανάλογα με τις απαιτήσεις κάθε εφαρμογής.

Η δημιουργία δομών όπως οι παραπάνω μπορεί να επιτευχθεί από την αυτό-οργάνωση κολλοειδών σωματιδίων, όπως το PS, μέσω της κατακάθισής τους σε διάλυμα. Γεμίζοντας τους πόρους της δομής που προκύπτει με άλλο υλικό και αφαιρώντας με κατάλληλη διαδικασία τα σφαιρίδια της αρχικής δομής είναι δυνατή η κατασκευή μιας αντίστροφης δομής, όπου ένα περιβάλλον υλικού συγκεκριμένης διηλεκτρικής σταθεράς διακόπτεται από κενούς σφαιρικούς πόρους στις θέσεις του αρχικού πλέγματος fcc. Με αυτόν τον τρόπο δημιουργούνται επίπεδα σφαιρών μικρότερης διηλεκτρικής σταθεράς από ότι του περιβάλλοντος μέσου.

Η μιγαδική δομή ζωνών για την αντίστροφη δομή TiO_2 και ο συντελεστής διέλευσης για αντίστοιχη πεπερασμένη δομή 32 επιπέδων δίνεται στο Σχ. 14. Το χάσμα που προκύπτει σε αυτήν την περίπτωση αντιστοιχεί στην περιοχή συχνοτήτων $\omega a/c$ από 2.383 έως 2.908. Δηλαδή, έχει εύρος 0.525, τριπλάσιο του εύρους χάσματος στην περίπτωση σφαιρών PS και πολύ μεγαλύτερο από αυτό για την περίπτωση σφαιρών TiO_2 στο κενό, ενώ παρουσιάζονται και άλλα χάσματα σε μεγαλύτερες συχνότητες.

Ο συντελεστής διέλευσης παρουσιάζει όμοια συμπεριφορά με την περίπτωση των σφαιρών πολυστυρενίου στο κενό, παίρνοντας μηδενική τιμή για τιμές συχνοτήτων εντός του χάσματος. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι ο συντελεστής διέλευσης μηδενίζεται και για κάποιες περιοχές συχνοτήτων που δεν αντιστοιχούν σε περιοχή χάσματος, αλλά στην ανώτερη ζώνη που απεικονίζεται στο Σχ. 14. Αυτό συμβαίνει γιατί για $g = 0$ τα κύματα Bloch που περιγράφονται από την Εξ. (2.118) μηδενίζονται. Επειδή για κάθετη πρόσπτωση μόνο αυτοί οι όροι αντιστοιχούν σε διαδιδόμενο κύμα στο εξωτερικό του κρυστάλλου το προσπίπτον κύμα δεν μπορεί

να διεγείρει τους εσωτερικούς τρόπους και άρα ανακλάται πλήρως.¹¹

3.4 Εφαρμογές φωτονικών κρυστάλλων

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι συγκεντρώνουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, τόσο από άποψη θεμελιώδους φυσικής, όσο και εφαρμογών στην οπτικοηλεκτρονική για τον έλεγχο της διάδοσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε διάφορα μήκη κύματος. Η αλληλεπίδραση αυτών των δομών με την ακτινοβολία δίνει τη δυνατότητα αναπαραγωγής των λειτουργικών αρχών των διαφορετικών στοιχείων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων με χρήση φωτονίων, αντί ηλεκτρονίων, ως φορέων πληροφορίας.

Η υπέρξη του χάσματος συχνοτήτων, όπως αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα, υποδηλώνει την ολική ανάκλαση των αντίστοιχων κυμάτων. Εισάγοντας ατέλειες στην περιοδική δομή του κρυστάλλου μπορούν να εμφανιστούν επιτρεπτοί τρόποι μέσα στην απαγορευμένη περιοχή συχνοτήτων. Φροντίζοντας αυτές οι τοπικές καταστάσεις να συμπίπτουν με τις φασματικές περιοχές εκπομπής εσωτερικών πηγών μπορεί να επιτευχθεί μηδενισμός των απωλειών, με εφαρμογή στην τεχνολογία των lasers .

Στην περίπτωση γραμμικών ατελειών εισάγονται κυματοδηγοί στον φωτονικό κρύσταλλο, όπου ο περιορισμός του φωτός επιτυγχάνεται μέσω των σχεδιάσεων Bragg, επιτρέποντας απότομες στροφές κατά τη διάδοση που δεν επιτυγχάνονται με τη συνήθη ολική ανάκλαση. Σε συνδιασμό με την ύπαρξη κοιλοτήτων, το παραπάνω φαινόμενο μπορεί να βρει εφαρμογή στην ανάπτυξη φίλτρων πρόσθεσης/τερματισμού καναλιών (add-drop filters) χωρίς τη διαταραχή των υπολοίπων καναλιών σε οπτικούς πολυπλέκτες.

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι βρίσκουν μεγάλη εφαρμογή στην τεχνολογία οπτικών ινών. Περιβάλλοντας τον πυρήνα της ίνας με μονοδιάστατο ή δισδιάστατο φωτονικό κρύσταλλο το διαδιδόμενο στο εσωτερικό φως αδυνατεί να διέλθει στο εξωτερικό εξαιτίας των χασμάτων και περιορίζεται στον πυρήνα της ίνας μέσω των σχεδιάσεων Bragg. Η δυνατότητα περιορισμού του φωτός σε υλικό χαμηλού δείκτη διάθλασης δίνει τη δυνατότητα κατασκευής οπτικών ινών με πυρήνα αέρα, επιτρέποντας τη διάδοση με ελάχιστες απώλειες και χωρίς σημαντική παραμόρφωση σήματος.

Πέρα από την εκμετάλλευση της υπέρξης περιοχής απαγορευμένων συχνοτήτων, η ιδιαίτερη συμπεριφορά του φωτός κατά τη διάδοσή του στις περιοχές κοντά στα όρια του χάσματος προσφέρει με τη σειρά της επιπλέον εφαρμογές. Λόγω της καμπύλωσης των ζωνών για αυτές τις συχνότητες η ταχύτητα ομάδας των αντίστοιχων κυμάτων μηδενίζεται. Αυτό υποδηλώνει μεγαλύτερης διάρκειας αλληλεπίδραση μεταξύ της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που διαδίδεται στο εσωτερικό του κρυστάλλου και των υλικών από τα οποία αποτελείται. Στην περίπτωση που αυτά είναι οπτικά ενεργά αυτό μπορεί να αποτελέσει σημαντικό πλεονέκτημα ενισχύοντας την απόδοση σχετικών φαινομένων.

Η δυνατότητα ενίσχυσης της φωτοκατάλυσης μέσω του φαινομένου αργών φωτονίων με χρήση φωτονικού κρυστάλλου έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά. Για παράδειγμα, αναφέρεται το άρθρο “Slow-photon enhancement of dye sensitized TiO_2 photocatalysis”¹³, όπου μελετάται η φωτοκαταλυτική απόδοση δείγματος αντίστροφης δομής TiO_2 στη διαδικασία φωτοαποδόμησης κυανού του μεθυλενίου, υπό UVA ακτινοβολία και υπό μονοχρωματικό ορατό φως, κοντά στις συχνότητες που αντιστοιχούν στην περιοχή των αργών φωτονίων. Τα δείγματα κατασκευάστηκαν εμποτίζοντας με τιτανία πυκνή δομή, $f = 0.74$, επιπέδων σφαιρών PS και διαπυρώνοντας για την απομάκρυνση του πολυστυρενίου και την κρυστάλλωση της δομής.

Το αρχικό πλέγμα PS που χρησιμοποιήθηκε ως μήτρα δημιουργήθηκε από αυτο-οργάνωση

των σφαιρών σε γυάλινα υποστρώματα. Η οργάνωση των σφαιρών σε πυκνή δομή επιπέδων fcc σε διάταξη επιστοιβάσης ABC επιβεβαιώθηκε με χρήση ηλεκτρονικής μικροσκοπίας (SEM). Ο αντίστοιχος συντελεστής διέλευσης, T , που προσδιορίστηκε πειραματικά βρίσκεται σε συμφωνία με τον προβλεπόμενο του Σχ. 9, με εμφάνιση ελαχίστου στην περιοχή του χάσματος και απότομες κορυφές στην περιοχή υψηλών ενεργειών εξ αιτίας της ύπαρξης ποικίλων υποζωνών, με διαφορά ότι η ταλαντωτική συμπεριφορά για χαμηλές ενέργειες δεν διακρίνεται λόγω της ανάλυσης των πειραματικών μετρήσεων.

Στην περίπτωση της τρισδιάστατης περιοδικής δομής διασυνδεδεμένων κενών πόρων σε περιβάλλον TiO_2 , έπειτα από την πλήρη απομάκρυνση του πολυστυρενίου, παρατηρήθηκε σμίξιση με τη θέρμανση με αποτέλεσμα ο συντελεστής κατάληψης να μεταβάλλεται σε $f = 0.26$. Συγκρίνοντας το φάσμα διέλευσης με άλλα δείγματα συμπαγούς τιτανίας και μεσοπορώδες υλικού, το δείγμα της αντίστροφης δομής TiO_2 παρουσίασε μια ευρεία καλά ορισμένη πτώση, χαρακτηριστική του φωτονικού χάσματος, μετατοπισμένη όμως από την προβλεπόμενη τιμή, υποδηλώνοντας μερική κατάληψη του διαθέσιμου 26% της fcc κυψελίδας, λόγω του διατηρούμενου πορώδους χαρακτήρα. Για συχνότητες στά άκρα του χάσματος παρατηρήθηκε σημαντική βελτίωση της απόδοσης της διαδικασίας αποικοδόμησης του κυανού του μεθυλενίου, με αύξηση του ενεργού οπτικού δρόμου. Η ενίσχυση της φωτοκατάλυσης, επιβεβαιώνει την ύπαρξη αργών φωτονίων, όπως προβλέφθηκε θεωρητικά.

A' Σφαιρικές συναρτήσεις Bessel

Οι συναρτήσεις Bessel $f_\ell(x)$ είναι οι λύσεις της διαφορικής εξίσωσης:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + q^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] f_\ell(qr) = 0 \quad (\text{A'.1})$$

ή ισοδύναμα:

$$f_\ell''(x) + \frac{2}{x} f_\ell'(x) + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] f_\ell(x) = 0 \quad (\text{A'.2})$$

με $x = qr$. Η εξίσωση αυτή αντιστοιχεί στο ακτινικό τμήμα της εξίσωσης Helmholtz. Οι λύσεις αυτές ικανοποιούν τις αναδρομικές σχέσεις:

$$(2\ell+1) f_\ell(x) = x f_{\ell-1}(x) + x f_{\ell+1}(x) \quad (\text{A'.3})$$

$$(2\ell+1) f_\ell'(x) = \ell f_{\ell-1}(x) - (\ell+1) f_{\ell+1}(x) \quad (\text{A'.4})$$

$$x f_\ell'(x) = \ell f_\ell(x) - x f_{\ell+1}(x) \quad (\text{A'.5})$$

$$x f_{\ell-1}(x) = x f_\ell'(x) + (\ell+1) f_\ell(x) \quad (\text{A'.6})$$

Η Εξ. (A'.2) για συγκεκριμένη τιμή του ℓ έχει δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις, τις σφαιρικές συναρτήσεις Bessel, $j_\ell(x)$, που είναι ομαλές στο $x = 0$ και τις σφαιρικές συναρτήσεις Neumann, $n_\ell(x)$, που αποκλίνουν στο $x \rightarrow 0$. Η αναλυτική μορφή αυτών των λύσεων³ είναι:

$$j_\ell(x) = (2x)^\ell \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+\ell)!}{s!(2s+2\ell+1)!} x^{2s} \quad (\text{A'.7})$$

$$n_\ell(x) = 2(-2x)^{-\ell-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-\ell)!}{s!(2s-2\ell)!} x^{2s} \quad (\text{A'.8})$$

Από τις αναδρομικές σχέσεις μπορεί ναδειχθεί ότι:

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell j_0(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left[\frac{\sin x}{x} \right] \quad (\text{A'.9})$$

$$n_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell n_0(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left[\frac{-\cos x}{x} \right] \quad (\text{A'.10})$$

Σημαντικοί είναι επίσης και οι γραμμικοί συνδιασμοί τους, οι συναρτήσεις Hankel:

$$h_\ell^+(x) = j_\ell(x) + i n_\ell(x) \quad (\text{A'.11})$$

$$h_\ell^-(x) = j_\ell(x) - i n_\ell(x) \quad (\text{A'.12})$$

Η ασυμπτωτική συμπεριφορά των συναρτήσεων Bessel για $x \gg 1$ είναι:

$$j_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (\text{A'.13})$$

$$n_\ell(x) \sim -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (\text{A'.14})$$

$$h_\ell^+(x) \sim (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} \quad (\text{A'.15})$$

$$h_\ell^-(x) \sim i^{\ell+1} \frac{e^{-ix}}{x} \quad (\text{A'.16})$$

ενώ για ορίσματα $x \ll 1$:

$$j_\ell(x) \sim \frac{x^\ell}{(2\ell + 1)!!} \quad (\text{A'.17})$$

$$n_\ell(x) \sim -\frac{(2\ell - 1)!!}{x^{\ell+1}} \quad (\text{A'.18})$$

B' Σφαιρικές αρμονικές

Οι σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ είναι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή \mathbf{L}^2 με ιδιοτιμές $\ell(\ell + 1)$. Αποτελούν το γωνιακό τμήμα των λύσεων της εξίσωσης Helmholtz και ικανοποιούν τη διαφορική εξίσωση:

$$\nabla^2 Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \right) \right] Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\mathbf{L}^2}{r^2} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.1})$$

Η αναλυτική μορφή τους είναι:

$$Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (\text{B'.2})$$

με $\ell = 0, 1, 2, \dots$ και $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$, ενώ P_{ℓ}^m είναι τα πολυώνυμα Legendre:

$$P_{\ell}^m(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^{\ell} \quad \text{για } m > 0$$

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_{\ell}^m(x) \quad \text{για } m < 0$$

όπου $x = \cos \theta$.

Οι σφαιρικές αρμονικές αποτελούν πλήρη ορθοκανονική βάση:

$$\sum_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') = \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}') \quad (\text{B'.3})$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (\text{B'.4})$$

Ικανοποιούν τη σχέση:

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi} \quad (\text{B'.5})$$

και τις ιδιότητες:

$$Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.6})$$

$$Y_{\ell m}(-\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.7})$$

Τέλος, οι σφαιρικές αρμονικές διαφορετικών τάξεων συνδέονται μέσω των σχέσεων:

$$\cos \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \zeta_{\ell+1}^m Y_{\ell+1 m}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_{\ell}^m Y_{\ell-1 m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.8})$$

$$e^{i\phi} \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 2 [\gamma_{\ell}^{-m} Y_{\ell-1 m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell+1}^{m+1} Y_{\ell+1 m+1}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (\text{B'.9})$$

$$e^{-i\phi} \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 2 [\gamma_{\ell+1}^{-m+1} Y_{\ell+1 m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell}^m Y_{\ell-1 m-1}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (\text{B'.10})$$

$$m \cot \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = - \left[a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\text{B'.11})$$

$$\text{όπου: } \gamma_\ell^m = \frac{[(\ell+m)(\ell+m-1)]^{1/2}}{2[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}} \text{ και } \zeta_\ell^m = \frac{[(\ell+m)(\ell-m)]^{1/2}}{[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}$$

Χρησιμοποιώντας αυτές τις σχέσεις μπορεί να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα: $\int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}$ ως εξής:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} &= \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) (\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}}) = \\ &= \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \left[\frac{e^{i\phi} \sin \theta + e^{-i\phi} \sin \theta}{2} \hat{\mathbf{x}} - \frac{e^{i\phi} \sin \theta - e^{-i\phi} \sin \theta}{2} i \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \right] = \\ &= \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \left[\frac{e^{i\phi} \sin \theta}{2} (\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}) + \frac{e^{-i\phi} \sin \theta}{2} (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \right] = \\ &= \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \left[(\gamma_\ell^{-m} Y_{\ell-1 m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell+1}^{m+1} Y_{\ell+1 m+1}(\hat{\mathbf{r}})) (\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}) + \right. \\ &\quad \left. + (\gamma_{\ell+1}^{-m+1} Y_{\ell+1 m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_\ell^m Y_{\ell-1 m-1}(\hat{\mathbf{r}})) (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) + \right. \\ &\quad \left. + (\zeta_{\ell+1}^m Y_{\ell+1 m}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_\ell^m Y_{\ell-1 m}(\hat{\mathbf{r}})) \hat{\mathbf{z}} \right] \end{aligned}$$

Από την Εξ. (B'.4) τελικά παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} &= \delta_{m' m+1} (-\gamma_{\ell+1}^{m+1} \delta_{\ell' \ell+1} + \gamma_\ell^{-m} \delta_{\ell' \ell-1}) (\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}) + \\ &\quad + \delta_{m' m-1} (\gamma_{\ell+1}^{-m+1} \delta_{\ell' \ell+1} - \gamma_\ell^m \delta_{\ell' \ell-1}) (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) + \\ &\quad + \delta_{m' m} (\zeta_{\ell+1}^m \delta_{\ell' \ell+1} + \zeta_\ell^m \delta_{\ell' \ell-1}) \hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (\text{B'.12})$$

Οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ ορίζονται ως:

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \mathbf{r} \times \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.13})$$

Εξ ορισμού: $\mathbf{X}_{00}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$ και για $\ell > 0$:

$$\begin{aligned} \sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_\ell^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\theta} + \\ &\quad + i \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - a_\ell^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\phi} = \\ &= \left[a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) + m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{z}} + a_\ell^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}) \right] \end{aligned} \quad (\text{B'.14})$$

με $a_\ell^m = \frac{1}{2} \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$.

Από τον ορισμό των $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ προκύπτουν οι σχέσεις:

$$\mathbf{L}^2 \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \ell(\ell+1) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.15})$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.16})$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}(-\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^\ell \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.17})$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} = X_{\ell m, \phi}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\theta} - X_{\ell m, \theta}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\phi} = \frac{-i r \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \quad (\text{B'.18})$$

$$\hat{\mathbf{r}} \times [\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}] = \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.19})$$

Οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές πληρούν τις σχέσεις ορθογωνιότητας:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\text{B'.20})$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})] = 0 \quad (\text{B'.21})$$

Η δράση των τελεστών $\nabla \cdot$ και $\nabla \times$ στις $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ δίνει:

$$\nabla \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 0 \quad (\text{B'.22})$$

$$\nabla \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{r} \left[i \sqrt{\ell(\ell+1)} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} \right] \quad (\text{B'.23})$$

Από αυτές τις σχέσεις προκύπτουν:

$$\nabla \cdot f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 0 \quad (\text{B'.24})$$

$$\begin{aligned} \nabla \times f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{r} \left[i \sqrt{\ell(\ell+1)} f_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - \right. \\ \left. - (x f_{\ell}(x))'_{qr} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} \right] \quad (\text{B'.25}) \end{aligned}$$

$$\nabla^2 f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = -q^2 f_{\ell}(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{B'.26})$$

Γ' Απόδειξη της Εξ. (1.65)

Παρουσιάζεται αναλυτικά η απόδειξη της σχέσης:

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} [a_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{z}} + a_{\ell}^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})]$$

όπου: $a_{\ell}^m = \frac{1}{2} \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}$.

Από τον ορισμό των σφαιρικών αρμονικών:

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \Rightarrow \sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.1)$$

$$\bullet \mathbf{L} = -i \mathbf{r} \times \nabla = -i r \left[\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{r}} \partial_r + \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\theta} \frac{1}{r} \partial_{\theta} + \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \partial_{\phi} \right] =$$

$$= -i \left[\hat{\phi} \partial_{\theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \partial_{\phi} \right] \quad (\Gamma'.2)$$

• $L_i = \hat{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{L}$ όπου:

$$\hat{\mathbf{x}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \cos \phi \hat{\theta} - \sin \phi \hat{\phi} \quad (\Gamma'.3)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} + \cos \phi \hat{\phi} \quad (\Gamma'.4)$$

$$\hat{\mathbf{z}} = \cos \theta \hat{\mathbf{r}} - \sin \theta \hat{\theta} \quad (\Gamma'.5)$$

Άρα:

$$L_x = i (\sin \phi \partial_{\theta} + \cos \phi \cot \theta \partial_{\phi}) \quad (\Gamma'.6)$$

$$L_y = -i (\cos \phi \partial_{\theta} - \sin \phi \cot \theta \partial_{\phi}) \quad (\Gamma'.7)$$

$$L_z = -i \partial_{\phi} \quad (\Gamma'.8)$$

• $L_{\pm} = L_x \pm i L_y$

Συνεπώς:

$$L_+ = i \sin \phi \partial_{\theta} + i \cos \phi \cot \theta \partial_{\theta} + \cos \phi \partial_{\theta} - \sin \phi \cot \theta \partial_{\phi} = e^{i\phi} (\partial_{\theta} + i \cot \theta \partial_{\phi}) \quad (\Gamma'.9)$$

$$L_- = i \sin \phi \partial_{\theta} + i \cos \phi \cot \theta \partial_{\theta} - \cos \phi \partial_{\theta} + \sin \phi \cot \theta \partial_{\phi} = e^{-i\phi} (-\partial_{\theta} + i \cot \theta \partial_{\phi}) \quad (\Gamma'.10)$$

Επιπλέον:

$$L_+ Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) = 2a_{\ell}^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.11)$$

$$L_- Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) = 2a_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\Gamma'.12)$$

Δηλαδή:

$$e^{i\phi} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} + i e^{i\phi} \cot \theta \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = 2a_{\ell}^m Y_{\ell m+1} \quad (\Gamma'.13)$$

$$-e^{-i\phi} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} + i e^{-i\phi} \cot \theta \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = 2a_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1} \quad (\Gamma'.14)$$

Θέλουμε να υπολογίσουμε το:

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = i \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} \hat{\theta} - \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} \hat{\phi} \right]$$

$$\blacktriangleright -i \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} \hat{\phi}$$

$$(\Gamma'.13) \Rightarrow -\frac{i}{2} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} = -\frac{\cot \theta}{2} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} - i a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} \quad (\Gamma'.15)$$

$$(\Gamma'.14) \Rightarrow -\frac{i}{2} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} = \frac{\cot \theta}{2} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} + i a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} \quad (\Gamma'.16)$$

Προσθέτοντας αυτές τις σχέσεις προκύπτει:

$$-i \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} = i \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} \right] \quad (\Gamma'.17)$$

$$\blacktriangleright \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} \hat{\theta}$$

$$(\Gamma'.13) \Rightarrow \frac{i}{2 \sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = \frac{a_{\ell}^m}{\cos \theta} e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} - \frac{1}{2 \cos \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} \quad (\Gamma'.18)$$

$$(\Gamma'.14) \Rightarrow \frac{i}{2 \sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = \frac{a_{\ell}^{-m}}{\cos \theta} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} + \frac{1}{2 \cos \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} \quad (\Gamma'.19)$$

Προσθέτοντας αυτές τις σχέσεις προκύπτει:

$$\frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = \frac{a_{\ell}^m}{\cos \theta} e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} + \frac{a_{\ell}^{-m}}{\cos \theta} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} \Rightarrow \quad (\Gamma'.20)$$

$$i \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = a_{\ell}^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1} + a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1} \quad (\Gamma'.21)$$

Επιπλέον, από την Εξ. (B'.2) παρατηρούμε ότι:

$$\frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = i m Y_{\ell m} \Rightarrow \quad (\Gamma'.22)$$

$$i \frac{\sin^2 \theta}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = -m \sin \theta Y_{\ell m} \quad (\Gamma'.23)$$

Προσθέτοντας τις Εξ. (Γ'.21) και (Γ'.23) προκύπτει:

$$\frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1} - m \sin \theta Y_{\ell m} + a_{\ell}^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1} \quad (\Gamma'.24)$$

Επομένως:

$$\begin{aligned} \sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= i \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} \hat{\theta} - \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} \hat{\phi} \right] = \\ &= \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1} - m \sin \theta Y_{\ell m} + a_{\ell}^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1} \right] \hat{\theta} + \\ &+ i \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} \right] \hat{\phi} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} \left[\cos \theta \cos \phi \hat{\theta} + i \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} + i \cos \phi \hat{\phi} - \sin \phi \hat{\phi} \right] + \\
&+ a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} \left[\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} - \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + i \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} - i \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} \right] + \\
&+ m Y_{\ell m} \left[-\sin \theta \hat{\theta} + \cos \theta \hat{\mathbf{r}} - \cos \theta \hat{\mathbf{r}} \right] + \\
&+ a_\ell^m Y_{\ell m+1} \left[\cos \theta \cos \phi \hat{\theta} - i \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} - i \cos \phi \hat{\phi} - \sin \phi \hat{\phi} \right] + \\
&+ a_\ell^m Y_{\ell m+1} \left[\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} - \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + i \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} - i \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} \right] = \\
&= a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} \left[\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \cos \phi \hat{\theta} - \sin \phi \hat{\phi} + i \left(\sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} + \cos \phi \hat{\phi} \right) \right] - \\
&- a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} \sin \theta (\cos \phi + i \sin \phi) \hat{\mathbf{r}} + m Y_{\ell m} \left[-\sin \theta \hat{\theta} + \cos \theta \hat{\mathbf{r}} - \cos \theta \hat{\mathbf{r}} \right] + \\
&+ a_\ell^m Y_{\ell m+1} \left[\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \cos \phi \hat{\theta} - \sin \phi \hat{\phi} - i \left(\sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} + \cos \phi \hat{\phi} \right) \right] - \\
&- a_\ell^m Y_{\ell m+1} \sin \theta (\cos \phi - i \sin \phi) \hat{\mathbf{r}} = \\
&= a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} [\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}] + m Y_{\ell m} \hat{\mathbf{z}} + a_\ell^m Y_{\ell m+1} [\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}] - \\
&- a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} \sin \theta e^{i\phi} \hat{\mathbf{r}} - a_\ell^m Y_{\ell m+1} \sin \theta e^{-i\phi} \hat{\mathbf{r}} - m Y_{\ell m} \cos \theta \hat{\mathbf{r}} \tag{\Gamma'.25}
\end{aligned}$$

Όμως από τις Εξ. (Γ'.20) και (Γ'.22) έχουμε ότι:

$$\begin{aligned}
\frac{a_\ell^m}{\cos \theta} e^{-i\phi} Y_{\ell m+1} + \frac{a_\ell^{-m}}{\cos \theta} e^{i\phi} Y_{\ell m-1} &= \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \phi} = -\frac{m}{\sin \theta} Y_{\ell m} \Rightarrow \\
a_\ell^m e^{-i\phi} \sin \theta Y_{\ell m+1} + a_\ell^{-m} e^{i\phi} \sin \theta Y_{\ell m-1} &= -m Y_{\ell m} \cos \theta \tag{\Gamma'.26}
\end{aligned}$$

Κατά συνέπεια, τελικά παίρνουμε:

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = a_\ell^{-m} Y_{\ell m-1} [\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}] + m Y_{\ell m} \hat{\mathbf{z}} + a_\ell^m Y_{\ell m+1} [\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}] \tag{\Gamma'.27}$$

Δ' Ανάπτυγμα επίπεδων κυμάτων σε σφαιρικές αρμονικές

Για την απόδειξη της σχέσης:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left[i^{\ell} j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (\Delta'.1)$$

πρέπει να προσδιοριστούν οι συντελεστές του αναπτύγματος:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} [c_{\ell m}(\mathbf{q}) j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (\Delta'.2)$$

Επιλέγοντας τον z -άξονα παράλληλο στο \mathbf{q} , δηλαδή $\mathbf{q} = q\hat{\mathbf{z}}$, έχουμε: $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = qr \cos \theta$. Επομένως, το $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{iqr \cos \theta}$ είναι ανεξάρτητο της γωνίας ϕ και άρα και το δεξί μέλος της ($\Delta'.2$) πρέπει να είναι ανεξάρτητο της γωνίας ϕ . Για να συμβαίνει αυτό από την Εξ. (B'.2) πρέπει όλοι οι συντελεστές $c_{\ell m}(q\hat{\mathbf{z}})$ για $m \neq 0$ να είναι μηδέν. Συνεπώς, η Εξ. ($\Delta'.2$) γίνεται:

$$\begin{aligned} e^{iqr \cos \theta} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell 0}(q\hat{\mathbf{z}}) j_{\ell}(qr) Y_{\ell 0}(\hat{\mathbf{r}}) \Rightarrow \\ e^{iqr \cos \theta} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} c_{\ell 0}(q\hat{\mathbf{z}}) j_{\ell}(qr) P_{\ell}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (\Delta'.3)$$

με αντικατάσταση της αναλυτικής μορφής των σφαιρικών αρμονικών (B'.2). Για τα πολυώνυμα Legendre ισχύει:

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (\Delta'.4)$$

Επομένως, πολλαπλασιάζοντας με $P_{\ell'}(\cos \theta)$ και ολοκληρώνοντας, από τη Εξ. ($\Delta'.3$) προκύπτει:

$$\int_{-1}^1 P_{\ell'}(w) e^{iqrw} dw = \frac{1}{\sqrt{\pi(2\ell'+1)}} j_{\ell'}(qr) c_{\ell' 0}(q\hat{\mathbf{z}}) \quad (\Delta'.5)$$

όπου $w = \cos \theta$.

► Υπολογισμός του ολοκληρώματος: $\int_{-1}^1 P_{\ell'}(w) e^{iqrw} dw$

Από τον τύπο του Rodrigues:

$$P_{\ell}(w) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dw^{\ell}} (w^2 - 1)^{\ell} \quad (\Delta'.6)$$

Επομένως:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 P_\ell(w) e^{iqrw} dw &= \int_{-1}^1 \frac{1}{2^\ell \ell!} e^{iqrw} \frac{d^\ell}{dw^\ell} (w^2 - 1)^\ell dw = \\
&= \frac{1}{2^\ell \ell!} \left[e^{iqrw} \frac{d^{\ell-1}}{dw^{\ell-1}} (w^2 - 1)^\ell \right]_{-1}^1 - \frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 \frac{d}{dw} e^{iqrw} \frac{d^{\ell-1}}{dw^{\ell-1}} (w^2 - 1)^\ell dw = \\
&= -\frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 \frac{d}{dw} e^{iqrw} \frac{d^{\ell-1}}{dw^{\ell-1}} (w^2 - 1)^\ell dw \tag{\Delta'.7}
\end{aligned}$$

Επαναλαμβάνοντας ℓ φορές:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 P_\ell(w) e^{iqrw} dw &= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 (w^2 - 1)^\ell \frac{d^\ell}{dw^\ell} e^{iqrw} dw = \\
&= \frac{(-qr)^\ell}{2^\ell \ell!} i^\ell \int_{-1}^1 (w^2 - 1)^\ell e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.8}
\end{aligned}$$

Παρατηρώντας ότι:

$$\int_{-1}^1 e^{iqrw} dw = \int_{-1}^1 \cos(qrw) dw + i \int_{-1}^1 \sin(qrw) dw = 2 \frac{\sin(qr)}{qr} \tag{\Delta'.9}$$

οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel από την Εξ. (Α'.9) για $x = qr$ μπορούν να γραφούν ως:

$$j_\ell(qr) = \frac{(-qr)^\ell}{2} \left(\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \right)^\ell \int_{-1}^1 e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.10}$$

Έχουμε ότι:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \int_{-1}^1 e^{iqrw} dw &= \frac{i}{2qr} \int_{-1}^1 2w e^{iqrw} dw = \frac{i}{2qr} \int_{-1}^1 e^{iqrw} d(w^2 - 1) = \\
&= \frac{i}{2qr} [(w^2 - 1) e^{iqrw}]_{-1}^1 - \frac{i}{2qr} iqr \int_{-1}^1 (w^2 - 1) e^{iqrw} dw = \\
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (w^2 - 1) e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.11}
\end{aligned}$$

Αντίστοιχα:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)}\right)^2 \int_{-1}^1 e^{iqrw} dw &= \frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \left[\frac{1}{2} \int_{-1}^1 (w^2 - 1) e^{iqrw} dw \right] = \\
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (w^2 - 1) \frac{2iw}{2qr} e^{iqrw} dw = \frac{1}{2} \frac{i}{2qr} \int_{-1}^1 e^{iqrw} (w^2 - 1) d(w^2 - 1) = \\
&= \frac{1}{2} \frac{i}{2qr} \left[\frac{(w^2 - 1)^2}{2} e^{iqrw} \right]_{-1}^1 - \frac{i}{2^2 qr} \int_{-1}^1 \frac{(w^2 - 1)^2}{2} iqr e^{iqrw} dw = \\
&= \frac{1}{2^2} \int_{-1}^1 (w^2 - 1)^2 e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.12}
\end{aligned}$$

Συνεχίζοντας έτσι παίρνουμε:

$$\left(\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)}\right)^\ell \int_{-1}^1 e^{iqrw} dw = \frac{1}{2^\ell \ell!} \int_{-1}^1 (w^2 - 1)^\ell e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.13}$$

Συνεπώς, η Εξ. (Δ'.10) γράφεται ως:

$$j_\ell(qr) = \frac{(-qr)^\ell}{2^{\ell+1} \ell!} \int_{-1}^1 (w^2 - 1)^\ell e^{iqrw} dw \tag{\Delta'.14}$$

Συγκρίνοντας με την Εξ. (Δ'.8) τελικά παίρνουμε ότι:

$$\int_{-1}^1 P_\ell(w) e^{iqrw} dw = 2i^\ell j_\ell(qr) \tag{\Delta'.15}$$

Από τις Εξ. (Δ'.5) και (Δ'.15) προκύπτει:

$$\begin{aligned}
2i^{\ell'} j_{\ell'}(qr) &= \frac{1}{\sqrt{\pi(2\ell' + 1)}} j_{\ell'}(qr) c_{\ell' 0}(q\hat{\mathbf{z}}) \Rightarrow \\
c_{\ell' 0}(q\hat{\mathbf{z}}) &= 2i^{\ell'} \sqrt{\pi(2\ell' + 1)} \tag{\Delta'.16}
\end{aligned}$$

Επομένως η Εξ. (Δ'.3) γράφεται:

$$e^{iqr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell + 1) j_\ell(qr) P_\ell(\cos \theta) \tag{\Delta'.17}$$

Ισχύει η σχέση:

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \tag{\Delta'.18}$$

όπου $\cos \theta = \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$. Επομένως τελικά η Εξ. (Δ'.17) γράφεται:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (\Delta'.19)$$

Δηλαδή οι συντελεστές της Εξ. (Δ'.2) δίνονται από τη σχέση:

$$c_{\ell m}(\mathbf{q}) = 4\pi i^{\ell} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (\Delta'.20)$$

Ε' Αναλυτικός υπολογισμός των $\mathbf{A}_{Elm}^0(\hat{\mathbf{q}})$ και $\mathbf{A}_{Hlm}^0(\hat{\mathbf{q}})$

Ένα μονοχρωματικό εγκάρσιο επίπεδο κύμα της μορφής: $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ με χρήση του αναπτύγματος:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} \left[i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right]$$

γράφεται ως:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 4\pi \sum_{\ell m} \left[i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (\text{E'.1})$$

Σε ομοιογενές και οπτικά ισότροπο μέσο το πεδίο είναι παντού πεπερασμένο. Συνεπώς, αναπτύσσουμε το $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ μόνο στα $\mathbf{J}_{Elm}(\mathbf{r})$ και $\mathbf{J}_{Hlm}(\mathbf{r})$. Δηλαδή έχουμε:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[a_{Elm}^0 \mathbf{J}_{Elm}(\mathbf{r}) + a_{Hlm}^0 \mathbf{J}_{Hlm}(\mathbf{r}) \right] \quad (\text{E'.2})$$

όπου: $\mathbf{J}_{Hlm}(\mathbf{r}) = j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$, $\mathbf{J}_{Elm}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{J}_{Hlm}(\mathbf{r})$ και $a_L^0 = \mathbf{A}_L^0(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q})$, με $L : Elm/Hlm$. Συνεπώς:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} a_{Elm}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{Hlm}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\text{E'.3})$$

► Υπολογισμός: $\mathbf{A}_{Hlm}^0(\hat{\mathbf{q}})$

Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (E'.3) με $\mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \\ &= \sum_{\ell m} \int d\hat{\mathbf{r}} \left[\frac{i}{q} a_{Elm}^0 \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) + a_{Hlm}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \end{aligned} \quad (\text{E'.4})$$

Από τις ιδιότητες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών (Παράρτημα Β') έχουμε:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\text{E'.5})$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}})] = 0 \quad (\text{E'.6})$$

$$\nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{r} \left[i\sqrt{\ell(\ell+1)} j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - (x j_\ell(x))'_{qr} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} \right] \quad (\text{E'.7})$$

και

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_\ell^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\theta} + \\ &+ i \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - a_\ell^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\phi} \end{aligned} \quad (\text{E'.8})$$

Επομένως:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = & \frac{1}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{r}}) - m' \sin \theta Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) + a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\theta} - \\ & - i \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{r}}) - a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\phi} \end{aligned} \quad (\text{E'.9})$$

Συνεπώς:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] &= -\frac{1}{r} (x j_\ell(x))'_{qr} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}) = \\ &= -\frac{1}{r} (x j_\ell(x))'_{qr} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}})) \end{aligned} \quad (\text{E'.10})$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (E'.4) τις Εξ. (E'.10), (E'.5) και (E'.6) παίρνουμε:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} (a_{H\ell m}^0 j_\ell(qr) \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}) = a_{H\ell'm'}^0 j_{\ell'}(qr) \quad (\text{E'.11})$$

Αντίστοιχα πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (E'.1) με $\mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας παίρνουμε:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \int d\hat{\mathbf{r}} \left[\mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_0 i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (\text{E'.12})$$

Γράφοντας το \mathbf{E}_0 ως: $\mathbf{E}_0 = E_{0q} \hat{\mathbf{q}} + E_{01} \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) + E_{02} \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})$, όπου: $\hat{\theta} \equiv \hat{\mathbf{e}}_1(\hat{\mathbf{q}})$, $\hat{\phi} \equiv \hat{\mathbf{e}}_2(\hat{\mathbf{q}})$ και αντικαθιστώντας το $\mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}})$ στην αναλυτική του μορφή παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \quad (\text{E'.13}) \\ &= \frac{4\pi}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \sum_{\ell m} \int d\hat{\mathbf{r}} \left\{ \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{r}}) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - m' \sin \theta Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) + a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{r}}) \right] E_{01} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) - \right. \\ &\quad \left. - i \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{r}}) - a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{r}}) \right] E_{02} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right\} \end{aligned}$$

Και από τη σχέση:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\text{E'.14})$$

Παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \quad (\text{E'.15}) \\ &= \frac{4\pi}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \sum_{\ell m} \left\{ a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta \delta_{\ell\ell'} \delta_{m(m'-1)} E_{01} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \\ &\quad \left. + a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta \delta_{\ell\ell'} \delta_{m(m'+1)} E_{01} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) - m' \sin \theta \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} E_{01} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) - \right. \\ &\quad \left. - i \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m(m'-1)} E_{02} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] + i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m(m'+1)} E_{02} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \right\} = \\ &= \frac{4\pi i^{\ell'}}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left\{ E_{01} \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta j_{\ell'}(qr) Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{q}}) + a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta j_{\ell'}(qr) Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{q}}) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - m' \sin \theta j_{\ell'}(qr) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] + E_{02} i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} j_{\ell'}(qr) Y_{\ell'm'+1}^*(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} j_{\ell'}(qr) Y_{\ell'm'-1}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \right\} \end{aligned}$$

Από τις ιδιότητες των σφαιρικών αρμονικών:

$$Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{E'.16})$$

Επομένως, τελικά παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \frac{4\pi i^{\ell'}}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} \left\{ E_{01} j_{\ell'}(qr) \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta (-1)^{m'-1} Y_{\ell'-m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\ &+ a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta (-1)^{m'+1} Y_{\ell'-m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) - m' \sin \theta (-1)^{m'} Y_{\ell'-m'}(\hat{\mathbf{q}}) \left. \right] + \\ &+ E_{02} j_{\ell'}(qr) i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} (-1)^{m'+1} Y_{\ell'-m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} (-1)^{m'-1} Y_{\ell'-m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \left. \right\} \quad (\text{E'.17}) \end{aligned}$$

Συγκρίνοντας τις Εξ. (E'.11) και (E'.17) μπορεί να προσδιοριστεί ο συντελεστής:

$$\begin{aligned} a_{H\ell' m'}^0 &= \frac{4\pi i^{\ell'}}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} (-1)^{m'+1} \left\{ E_{01} \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell'-m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\ &+ a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell'-m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m' \sin \theta Y_{\ell'-m'}(\hat{\mathbf{q}}) \left. \right] + \\ &+ E_{02} i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} (-1)^{m'+1} Y_{\ell'-m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} Y_{\ell'-m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \left. \right\} \quad (\text{E'.18}) \end{aligned}$$

Όμως: $a_{H\ell' m'}^0 = \mathbf{A}_{H\ell' m'}^0(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q})$. Επομένως:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{H\ell m}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^{\ell} (-1)^{m+1}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \times \\ &\times \left\{ \left[a_{\ell}^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\ &+ a_{\ell}^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \left. \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) + \\ &+ i \left[a_{\ell}^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell}^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \left. \right\} = \\ &= 4\pi i^{\ell} (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (\text{E'.19}) \end{aligned}$$

► Υπολογισμός: $\mathbf{A}_{E\ell m}^0(\hat{\mathbf{q}})$

Από την Εξ. (1.24):

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\mu_0 \mu \omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\mu_0 \mu \omega} \mathbf{q} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\mu_0 \mu \omega} \frac{\omega \sqrt{\epsilon \mu}}{c} \hat{\mathbf{q}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \Rightarrow \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \hat{\mathbf{q}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (\text{E'.20}) \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (Ε'.1) παίρνουμε:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} [\hat{\mathbf{q}} \times \mathbf{E}_0] 4\pi \sum_{\ell m} \left[i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \right] \quad (\text{Ε'.21})$$

Από την Εξ. (1.89) το ανάπτυγμα του $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ είναι:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\text{Ε'.22})$$

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Ε'.22) με το $\mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας, αντίστοιχα με προηγούμενως, προκύπτει:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} a_{E\ell' m'}^0 j_{\ell'}(qr) \quad (\text{Ε'.23})$$

Έχουμε: $\hat{\mathbf{q}} \times \mathbf{E}_0 = \hat{\mathbf{q}} \times [E_{0q} \hat{\mathbf{q}} + E_{01} \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) + E_{02} \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})] = E_{01} \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) - E_{02} \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q})$.

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Ε'.21) με το $\mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας, αντίστοιχα με την Εξ. (Ε'.17), προκύπτει:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \frac{4\pi i^{\ell'}}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} (-1)^{m'+1} j_{\ell'}(qr) \times \\ &\times \left\{ -E_{02} \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell' -m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\ &+ a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell' -m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m' \sin \theta Y_{\ell' -m'}(\hat{\mathbf{q}}) \left. \right] + \\ &+ E_{01} i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} Y_{\ell' -m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} Y_{\ell' -m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{Ε'.24})$$

Συγκρίνοντας τις Εξ. (Ε'.23) και (Ε'.24) προκύπτει:

$$\begin{aligned} a_{E\ell' m'}^0 &= \frac{4\pi i^{\ell'}}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}} (-1)^{m'+1} \left\{ -E_{02} \left[a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell' -m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) + \right. \right. \\ &+ a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell' -m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m' \sin \theta Y_{\ell' -m'}(\hat{\mathbf{q}}) \left. \right] + \\ &+ E_{01} i \left[a_{\ell'}^{m'} e^{i\phi} Y_{\ell' -m'-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_{\ell'}^{-m'} e^{-i\phi} Y_{\ell' -m'+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{Ε'.25})$$

Από τη σχέση: $a_{E\ell' m'}^0 = \mathbf{A}_{E\ell' m'}^0(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q})$, τελικά παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{E\ell m}^0(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \times \\ &\times \left\{ i \left[a_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - a_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) - \right. \\ &- \left[a_\ell^m \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin \theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \right. \\ &+ \left. \left. a_\ell^{-m} \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \right\} = \\ &= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \times \hat{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (\text{Ε'.26})$$

Επομένως, αποδεικνύονται οι Εξ. (1.92) και (1.93).

Γ' Εύρεση του πίνακα σκέδασης μεμονωμένου σφαιρικού σωματιδίου

Θεωρούμε ομοιογενή και ιστροπική σφαίρα ακτίνας S , στην αρχή των αξόνων του συστήματος συντεταγμένων, με σχετική διηλεκτική σταθερά, ϵ_s , και σχετική μαγνητική διαπερατότητα, μ_s , διαφορετικές από τις ϵ, μ του μέσου εντός του οποίου είναι τοποθετημένη.

Στο εσωτερικό του σωματιδίου έχουμε τα πεδία:

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}), \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r})$$

και στο εξωτερικό έχουμε το άθροισμα του προσπίπτοντος και του σχεδαζόμενου πεδίου:

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

όπου

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

$$\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} a_{E\ell m}^+ \nabla \times h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\Gamma'.2)$$

$$\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q_s} a_{E\ell m}^{\text{in}} \nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\Gamma'.3)$$

Και:

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^0 \nabla \times j_\ell(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\Gamma'.4)$$

$$\mathbf{H}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q} a_{H\ell m}^+ \nabla \times h_\ell^+(qr) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\Gamma'.5)$$

$$\mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} \sum_{\ell m} \left[a_{E\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_s} a_{H\ell m}^{\text{in}} \nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \quad (\Gamma'.6)$$

Από τις συνοριακές συνθήκες στην επιφάνεια της σφαίρας, $r = S$, παίρνουμε:

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (\Gamma'.7)$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (\Gamma'.8)$$

$$\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (\Gamma'.9)$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \quad (\Gamma'.10)$$

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Γ'.3) με το $\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\ell m} \left\{ \frac{i}{q_s} a_{E\ell m}^{\text{in}} \int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) + \right. \\ &\quad \left. + a_{H\ell m}^{\text{in}} \int d\hat{\mathbf{r}} j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right\} \quad (\Gamma'.11) \end{aligned}$$

Ισχύει η σχέση (Παράρτημα Β):

$$\nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{r} \left[i\sqrt{\ell(\ell+1)} j_\ell(q_s r) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} - (x j_\ell(x))'_{q_s r} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} \right] \quad (\Gamma'.12)$$

και επιπλέον:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (\Gamma'.13)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}})] = 0 \quad (\Gamma'.14)$$

Επομένως:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = a_{H\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s r) \quad (\Gamma'.15)$$

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Γ'.3) με το $\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\ell m} \left\{ \frac{i}{q_s} a_{E\ell m}^{\text{in}} \int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot (\nabla \times j_\ell(q_s r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) + \right. \\ &\quad \left. + a_{H\ell m}^{\text{in}} \int d\hat{\mathbf{r}} j_\ell(q_s r) [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right\} \quad (\Gamma'.16) \end{aligned}$$

Έχουμε ότι: $[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \hat{\mathbf{r}} = 0$. Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την ταυτότητα: $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{B} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$ παίρνουμε ότι:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot [\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}] &= (\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})) = \\ &= -\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. (Γ'.16):

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{r q_s} a_{E\ell m}^{\text{in}} [x j_\ell(x)]'_{q_s r} \quad (\Gamma'.17)$$

Αντίστοιχα για τα \mathbf{E}_0 , \mathbf{E}_{sc} , παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο των Εξ. (Γ'.1) και (Γ'.2) αρχικά με το $\mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και έπειτα με το $\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})$ και ολοκληρώνοντας βρίσκουμε ότι:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = a_{H\ell m}^0 j_\ell(qr) \quad (\Gamma'.18)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = a_{H\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \quad (\Gamma'.19)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \frac{i}{r q} a_{E\ell m}^0 [x j_\ell(x)]'_{qr} \quad (\Gamma'.20)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{r q} a_{E\ell m}^+ [x h_\ell^+(x)]'_{qr} \quad (\Gamma'.21)$$

Συνεπώς:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = a_{H\ell m}^0 j_\ell(qr) + a_{H\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \quad (\Gamma'.22)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{r q} \left[a_{E\ell m}^0 [x j_\ell(x)]'_{qr} + a_{E\ell m}^+ [x h_\ell^+(x)]'_{qr} \right] \quad (\Gamma'.23)$$

Από τις Εξ. (Γ'.15) έως (Γ'.23), αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες (Γ'.7) και (Γ'.8) προκύπτουν οι σχέσεις:

$$a_{H\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s S) = a_{H\ell m}^0 j_\ell(qS) + a_{H\ell m}^+ h_\ell^+(qS) \quad (\Gamma'.24)$$

$$\frac{i}{Sq_s} a_{E\ell m}^{\text{in}} [xj_\ell(x)]'_{q_s S} = \frac{i}{Sq} \left[a_{E\ell m}^0 [xj_\ell(x)]'_{qS} + a_{E\ell m}^+ [xh_\ell^+(x)]'_{qS} \right] \quad (\Gamma'.25)$$

Αντίστοιχα για τα \mathbf{H} :

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} j_\ell(q_s r) a_{E\ell m}^{\text{in}} \quad (\Gamma'.26)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{rq_s} \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} [xj_\ell(x)]'_{q_s r} a_{H\ell m}^{\text{in}} \quad (\Gamma'.27)$$

και:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qr) + a_{E\ell m}^+ h_\ell^+(qr) \right] \quad (\Gamma'.28)$$

$$\int d\hat{\mathbf{r}} [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{rq} \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \left[a_{H\ell m}^0 [xj_\ell(x)]'_{qr} + a_{H\ell m}^+ [xh_\ell^+(x)]'_{qr} \right] \quad (\Gamma'.29)$$

Από τις Εξ. (Γ'.26) έως (Γ'.29), αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες (Γ'.9) και (Γ'.10) προκύπτουν οι σχέσεις:

$$\sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} a_{E\ell m}^{\text{in}} j_\ell(q_s S) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \left[a_{E\ell m}^0 j_\ell(qS) + a_{E\ell m}^+ h_\ell^+(qS) \right] \quad (\Gamma'.30)$$

$$\frac{i}{Sq_s} \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{\mu_0 \mu_s}} a_{H\ell m}^{\text{in}} [xj_\ell(x)]'_{q_s S} = \frac{i}{Sq} \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon}{\mu_0 \mu}} \left[a_{H\ell m}^0 [xj_\ell(x)]'_{qS} + a_{H\ell m}^+ [xh_\ell^+(x)]'_{qS} \right] \quad (\Gamma'.31)$$

Έχουμε: $\frac{q}{q_s} = \frac{\sqrt{\epsilon \mu}}{\sqrt{\epsilon_s \mu_s}}$

Από τις Εξ. (Γ'.24) και (Γ'.25) συνεπάγεται ότι:

$$a_{H\ell m}^{\text{in}} = a_{H\ell m}^0 \frac{j_\ell(qS)}{j_\ell(q_s S)} + a_{H\ell m}^+ \frac{h_\ell^+(qS)}{j_\ell(q_s S)} \quad (\Gamma'.32)$$

και

$$a_{E\ell m}^{\text{in}} = \frac{q_s}{q} a_{E\ell m}^0 \frac{[xj_\ell(x)]'_{qS}}{[xj_\ell(x)]'_{q_s S}} + \frac{q_s}{q} a_{E\ell m}^+ \frac{[xh_\ell^+(x)]'_{qS}}{[xj_\ell(x)]'_{q_s S}} \quad (\Gamma'.33)$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (Γ'.33) στην Εξ. (Γ'.30) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} a_{E\ell m}^+ h_\ell^+(qS) &= \sqrt{\frac{\epsilon_s}{\mu_s}} j_\ell(q_s S) \left[\frac{q_s}{q} a_{E\ell m}^0 \frac{[xj_\ell(x)]'_{qS}}{[xj_\ell(x)]'_{q_s S}} + \frac{q_s}{q} a_{E\ell m}^+ \frac{[xh_\ell^+(x)]'_{qS}}{[xj_\ell(x)]'_{q_s S}} \right] - \\ &- \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} a_{E\ell m}^0 j_\ell(qS) \Rightarrow \\ a_{E\ell m}^+ &= \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{qS} \epsilon_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{qS} \epsilon_s} a_{E\ell m}^0 \end{aligned} \quad (\Gamma'.34)$$

Επομένως:

$$T_{E\ell} = \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \epsilon - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{q_s S} \epsilon_s} \quad (\Gamma'.35)$$

Αντίστοιχα, αντικαθιστώντας την Εξ. (Γ'.32) στην Εξ. (Γ'.31) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} & \frac{q}{q_s} \sqrt{\frac{\epsilon_s}{\mu_s}} [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \left[a_{H\ell m}^0 \frac{j_\ell(qS)}{j_\ell(q_s S)} + a_{H\ell m}^+ \frac{h_\ell^+(qS)}{j_\ell(q_s S)} \right] = \\ & = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} [xj_\ell(x)]'_{qS} a_{H\ell m}^0 + \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} [xh_\ell^+(x)]'_{qS} a_{H\ell m}^+ \Rightarrow \\ & a_{H\ell m}^+ \left[\frac{1}{\mu_s} [xj_\ell(x)]'_{q_s S} h_\ell^+(qS) - \frac{1}{\mu} [xh_\ell^+(x)]'_{qS} j_\ell(q_s S) \right] = \\ & = a_{H\ell m}^0 \left[\frac{1}{\mu} [xj_\ell(x)]'_{qS} j_\ell(q_s S) - \frac{1}{\mu_s} [xj_\ell(x)]'_{q_s S} j_\ell(qS) \right] \Rightarrow \\ a_{H\ell m}^+ & = \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{qS} \mu_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{qS} \mu_s} a_{H\ell m}^0 \end{aligned} \quad (\Gamma'.36)$$

Επομένως:

$$T_{H\ell} = \frac{j_\ell(q_s S) [xj_\ell(x)]'_{qS} \mu_s - j_\ell(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu}{h_\ell^+(qS) [xj_\ell(x)]'_{q_s S} \mu - j_\ell(q_s S) [xh_\ell^+(x)]'_{qS} \mu_s} \quad (\Gamma'.37)$$

Δηλαδή, αποδεικνύονται οι Εξ. (2.19) και (2.20).

Z' Απόδειξη των Εξ. (2.23), (2.24) και (2.25)

Έστω σύστημα μη αλληλεπικαλυπτόμενων σκεδαστών, διατεταγμένων σε θέσεις \mathbf{R}_n . Θέλουμε να εκφράσουμε τα εξερχόμενα βαθμωτά σφαιρικά κύματα γύρω από τη θέση \mathbf{R}'_n ως εισερχόμενα στη θέση \mathbf{R}_n . Ορίζουμε τα δανύσματα:

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n \quad (Z'.1)$$

$$\mathbf{r}_{n'} = \mathbf{r} - \mathbf{R}'_n \quad (Z'.2)$$

$$\mathbf{R}_{nn'} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}'_n \quad (Z'.3)$$

Ισχύουν οι μαθηματικές ταυτότητες³:

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

$$\frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(qr_<) h_\ell^+(qr_>) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}') \quad (Z'.5)$$

με $r_< \equiv \min(r, r')$ και $r_> \equiv \max(r, r')$.

Θεωρώντας οδηγό διάνυσμα μετατόπισης, \mathbf{r}_0 , τέτοιο ώστε: $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n| < R_{nn'}$ και $r_0 < |\mathbf{r}_n + \mathbf{R}_{nn'}|$, όπου $|\mathbf{r}_n + \mathbf{R}_{nn'}| = r_{n'}$, από την Εξ. (Z'.5) παίρνουμε:

$$\frac{e^{iq|(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n) - \mathbf{R}_{nn'}|}}{|(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n) - \mathbf{R}_{nn'}|} = 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(q|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n|) h_\ell^+(qR_{nn'}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \quad (Z'.6)$$

και

$$\begin{aligned} \frac{e^{iq|(\mathbf{R}_{nn'} + \mathbf{r}_n) - \mathbf{r}_0|}}{|(\mathbf{R}_{nn'} + \mathbf{r}_n) - \mathbf{r}_0|} &= 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(qr_0) h_\ell^+(q|\mathbf{R}_{nn'} + \mathbf{r}_n|) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'} + \hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) = \\ &= 4\pi i q \sum_{\ell m} j_\ell(qr_0) h_\ell^+(qr_{n'}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) \end{aligned} \quad (Z'.7)$$

Όμως:

$$\frac{e^{iq|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n - \mathbf{R}_{nn'}|}}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n - \mathbf{R}_{nn'}|} = \frac{e^{iq|\mathbf{R}_{nn'} + \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{R}_{nn'} + \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_0|} \quad (Z'.8)$$

Συνεπώς, από τις Εξ. (Z'.6) και (Z'.7):

$$\sum_{\ell m} j_\ell(q|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n|) h_\ell^+(qR_{nn'}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) = \sum_{\ell m} j_\ell(qr_0) h_\ell^+(qr_{n'}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) \quad (Z'.9)$$

Από την Εξ. (Z'.4) παίρνουμε:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n)} = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n} = 4\pi \sum_{\ell m} i^\ell j_\ell(q|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n|) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.10)$$

και

$$\begin{aligned}
e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} &= 4\pi \sum_{\ell'm'} i^{\ell'} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{r}}_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{q}}) = \\
&= 4\pi \sum_{\ell'm'} i^{\ell'} j_{\ell'}(qr_0) (-1)^{m'} Y_{\ell' -m'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) (-1)^{m'} Y_{\ell' -m'}(\hat{\mathbf{q}}) = \\
&= 4\pi \sum_{\ell'm'} i^{\ell'} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.11)
\end{aligned}$$

όπου στο ενδιάμεσο βήμα χρησιμοποιήθηκε η ιδιότητα των σφαιρικών αρμονικών (B'.6), και αφού η άθροιση στα m' γίνεται από $-\ell'$ έως ℓ' ο δείκτης $-m'$ στην τελευταία γραμμή μπορεί να αντικατασταθεί από τον m' .

Αντίστοιχα:

$$\begin{aligned}
e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n} &= [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n}]^* = 4\pi \sum_{\ell m} (-i)^\ell j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}) = \\
&= 4\pi \sum_{\ell m} (-i)^\ell j_\ell(qr_n) (-1)^m Y_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}_n) (-1)^m Y_{\ell -m}^*(\hat{\mathbf{q}}) = \\
&= 4\pi \sum_{\ell m} (-i)^\ell j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.12)
\end{aligned}$$

όπου $(-i)^\ell = (-1)^\ell i^\ell = i^\ell / (-1)^\ell = i^\ell / i^{2\ell} = i^{-\ell}$.

Επομένως, από τις Εξ. (Z'.10), (Z'.11) και (Z'.12) παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
\sum_{\ell m} i^\ell j_\ell(q|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n|) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) &= \\
&= 4\pi \sum_{\ell'm', \ell m} i^{\ell' - \ell} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}}) j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.13)
\end{aligned}$$

Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (Z'.13) με $Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}})$ και ολοκληρώνοντας στις γωνίες, με χρήση της Εξ. (B'.4), παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
i^{\ell''} j_{\ell''}(q|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n|) Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{\mathbf{r}}_n) &= 4\pi \sum_{\ell'm', \ell m} i^{\ell' - \ell} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \times \\
&\times \int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.14)
\end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (Z'.14) στην (Z'.9):

$$\begin{aligned}
\sum_{\ell'm'} j_{\ell'}(qr_0) h_{\ell'}^+(qr_{n'}) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) &= \sum_{\ell''m''} h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell''m''}^*(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \times \\
\times 4\pi \sum_{\ell'm', \ell m} i^{\ell' - \ell - \ell''} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) &\int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (Z'.15)
\end{aligned}$$

Δηλαδή:

$$\begin{aligned}
\sum_{\ell'm'} j_{\ell'}(qr_0) Y_{\ell'm'}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) \left[h_{\ell'}^+(qr_{n'}) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) - \sum_{\ell m, \ell''m''} h_{\ell''}^+(qR_{nn'}) Y_{\ell''m''}^*(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \times \right. \\
\left. \times 4\pi i^{\ell' - \ell - \ell''} j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}}) Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) \right] = 0 \quad (Z'.16)
\end{aligned}$$

Εφόσον η εξίσωση ισχύει ταυτοτικά και όχι για συγκεκριμένο $\hat{\mathbf{r}}_0$ πρέπει η αγκύλη να μηδενίζεται για κάθε όρο $\ell'm'$ του αθροίσματος. Συνεπώς:

$$h_{\ell'}^+(qr_{n'})Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{r}}_{n'}) = \sum_{\ell m} G_{\ell'm';\ell m}(\mathbf{R}_{nn'}, q)j_{\ell}(qr_n)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (\text{Z'.17})$$

όπου οι συντελεστές $G_{\ell'm';\ell m}$ δίνονται από την σχέση:

$$\begin{aligned} G_{\ell'm';\ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) &= 4\pi \sum_{\ell''m''} i^{\ell'-\ell-\ell''} h_{\ell''}^+(qR_{nn'})Y_{\ell''m''}^*(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) = \\ &= 4\pi \sum_{\ell''m''} (-1)^{\frac{\ell'-\ell-\ell''}{2}} h_{\ell''}^+(qR_{nn'})(-1)^{m''}Y_{\ell''-m''}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \int d\hat{\mathbf{q}} (-1)^m Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) = \\ &= 4\pi \sum_{\ell''m''} (-1)^{\frac{\ell'-\ell-\ell''}{2}} (-1)^{m+m''} h_{\ell''}^+(qR_{nn'})Y_{\ell''-m''}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) = \\ &= 4\pi \sum_{\ell''m''} (-1)^{\frac{\ell'-\ell-\ell''}{2}} (-1)^{m+m''} B_{\ell'm'}(\ell''m''; \ell m) h_{\ell''}^+(qR_{nn'})Y_{\ell''-m''}(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}) \end{aligned} \quad (\text{Z'.18})$$

όπου:

$$B_{\ell'm'}(\ell''m''; \ell m) = \int d\hat{\mathbf{q}} Y_{\ell'm'}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}})Y_{\ell''m''}(\hat{\mathbf{q}}) \quad (\text{Z'.19})$$

Επομένως, αποδεικνύονται οι Εξ. (2.23), (2.24) και (2.25).

Η' Απόδειξη των Εξ. (2.27)-(2.30)

Από την Εξ. (2.26) έχουμε:

$$\mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_L \Omega_{LL'}^{nn'} \mathbf{J}_L(\mathbf{r}_n) \quad (\text{H'.1})$$

Δρώντας με $\frac{i}{q} \nabla \times$ προκύπτει:

$$\frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_L \frac{i}{q} \Omega_{LL'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_L(\mathbf{r}_n) \quad (\text{H'.2})$$

Επιπλέον, από τις Εξ. (1.81) και (1.82):

$$\mathbf{J}_{Elm}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{J}_{Hlm}(\mathbf{r}) \quad (\text{H'.3})$$

$$\mathbf{H}_{Elm}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{H}_{Hlm}(\mathbf{r}) \quad (\text{H'.4})$$

Η Εξ. (H'.2) για $L' = H$ με χρήση των Εξ. (H'.3) και (H'.4) παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{H}_{H\ell'm'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} \Omega_{H\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) + \frac{i}{q} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \Rightarrow \\ \mathbf{H}_{E\ell'm'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \sum_{\ell m} \left[\Omega_{H\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) + \frac{i}{q} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \end{aligned} \quad (\text{H'.5})$$

Ο δεύτερος όρος στην αγκύλη μπορεί με την Εξ. (H'.4) και την ταυτότητα: $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ να γραφεί ως:

$$\begin{aligned} \frac{i}{q} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) &= \frac{i}{q} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \left(\frac{i}{q} \nabla \times \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) \right) = \\ &= -\frac{1}{q^2} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n)) - \nabla^2 \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n)] \end{aligned} \quad (\text{H'.6})$$

Όμως: $\mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) = j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n)$ και από τις ιδιότητες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών έχουμε: $\nabla \cdot j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\mathbf{r}_n) = 0$ και $\nabla^2 j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\mathbf{r}_n) = -q^2 j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\mathbf{r}_n)$. Αντικαθιστώντας λοιπόν στην Εξ. (H'.6) παίρνουμε:

$$\frac{i}{q} \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \nabla \times \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) = -\Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) \quad (\text{H'.7})$$

και, τελικά, η Εξ. (H'.5) γράφεται:

$$\mathbf{H}_{E\ell'm'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_{\ell m} \left[\Omega_{H\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) - \Omega_{E\ell m; H\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \quad (\text{H'.8})$$

Η Εξ. (H'.1) για $L' = E$ γράφεται:

$$\mathbf{H}_{E\ell'm'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_{\ell m} \left[\Omega_{E\ell m; E\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) + \Omega_{H\ell m; E\ell'm'}^{nn'} \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \quad (\text{H'.9})$$

Επομένως, συγκρίνοντας τις Εξ. (Η'.8) και (Η'.9) παίρνουμε:

$$\sum_{\ell m} \left[\Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) + \Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] = \quad (\text{Η'.10})$$

$$= \sum_{\ell m} \left[\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) - \Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \quad (\text{Η'.11})$$

Συνεπώς:

$$\Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \quad (\text{Η'.12})$$

και

$$\Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = -\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \quad (\text{Η'.13})$$

Η Εξ. (Η'.1) για $L' = H$ γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \sum_{\ell m} \left[\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{H\ell m}(\mathbf{r}_n) + \Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \mathbf{J}_{E\ell m}(\mathbf{r}_n) \right] \Rightarrow \\ \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \sum_{\ell m} \left[\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) + \Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} \frac{i}{q} j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right] \end{aligned} \quad (\text{Η'.14})$$

Από τις ιδιότητες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών (Εξ. (Β'.25)) έχουμε:

$$\nabla \times j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \frac{1}{r_n} \left[i\sqrt{\ell(\ell+1)} j_\ell(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \hat{\mathbf{r}}_n - (x j_\ell(x))'_{qr_n} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \times \hat{\mathbf{r}}_n \right]$$

Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Η'.14) με το $\mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n)$ και ολοκληρώνοντας, χρησιμοποιώντας επιπλέον τις σχέσεις ορθογωνιότητας για τις διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές, έχουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \int d\hat{\mathbf{r}}_n \left(\sum_{\ell m} \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} j_\ell(qr_n) \mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right) \Rightarrow \\ \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \sum_{\ell m} \Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} j_\ell(qr_n) \delta_{\ell'' \ell} \delta_{m'' m} \Rightarrow \\ \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \Omega_{H\ell'' m''; H\ell' m'}^{nn'} j_{\ell''}(qr_n) \Rightarrow \\ \Omega_{H\ell'' m''; H\ell' m'}^{nn'} &= \frac{1}{j_{\ell''}(qr_n)} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \end{aligned} \quad (\text{Η'.15})$$

Αντίστοιχα, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Η'.14) με το $\hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n)$ και ολοκληρώνοντας, λαμβάνοντας υπόψιν τις Εξ. (Β'.14) και (Β'.25), παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \int d\hat{\mathbf{r}}_n \sum_{\ell m} i\sqrt{\ell(\ell+1)} \frac{i}{qr_n} \Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} j_\ell(qr_n) \delta_{\ell'' \ell} \delta_{m'' m} \Rightarrow \\ \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) &= \frac{-1}{qr_n} \Omega_{E\ell'' m''; H\ell' m'}^{nn'} \sqrt{\ell''(\ell''+1)} j_{\ell''}''(qr_n) \Rightarrow \\ \Omega_{E\ell'' m''; H\ell' m'}^{nn'} &= \frac{-qr_n}{j_{\ell''}(qr_n) \sqrt{\ell''(\ell''+1)}} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell'' m''}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \end{aligned} \quad (\text{Η'.16})$$

Συνεπώς, αποδεικνύονται οι σχέσεις:

$$\Omega_{H\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = \Omega_{E\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \frac{1}{j_\ell(qr_n)} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (\text{H'.17})$$

$$\Omega_{E\ell m; H\ell' m'}^{nn'} = -\Omega_{H\ell m; E\ell' m'}^{nn'} = \frac{-qr_n}{j_\ell(qr_n)\sqrt{\ell(\ell+1)}} \int d\hat{\mathbf{r}}_n \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (\text{H'.18})$$

Θ' Προσδιορισμός των $\Delta_{E\ell m}(\mathbf{K}_g^s)$ και $\Delta_{H\ell m}(\mathbf{K}_g^s)$

Το σχεδάζόμενο κύμα γράφεται σε μορφή αναπτύγματος σε διανυσματικά σφαιρικά κύματα ως:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)} \sum_L b_L^+ \mathbf{H}_L(\mathbf{r}_n) = \\ &= \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} b_{E\ell m}^+ \nabla \times \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)} h_{\ell}^+(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) + b_{H\ell m}^+ \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n)} h_{\ell}^+(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) \right] \end{aligned} \quad (\Theta'.1)$$

Από την αναλυτική έκφραση των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} \cos \theta Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{\ell}^m e^{-i\phi} \cos \theta Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\theta} + \\ &+ i \left[a_{\ell}^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - a_{\ell}^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \hat{\phi} \end{aligned} \quad (\Theta'.2)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.69):

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n} h_{\ell}^+(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \quad (\Theta'.3)$$

παίρνουμε ότι:

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n} h_{\ell}^+(qr_n) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \quad (\Theta'.4)$$

Επομένως, η Εξ. (Θ'.1):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) &= \sum_{\ell m} \left[\frac{i}{q} b_{E\ell m}^+ \nabla \times \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} + b_{H\ell m}^+ \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \right] = \\ &= \sum_{\ell m} \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \left[\frac{i}{q} b_{E\ell m}^+ \nabla \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} + b_{H\ell m}^+ \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \right] = \\ &= \sum_{\ell m} \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \left[\frac{i}{q} b_{E\ell m}^+ i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} + b_{H\ell m}^+ \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \right] \end{aligned} \quad (\Theta'.5)$$

και αφού $|\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s| = q$ τελικά παίρνουμε:

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} \left[b_{E\ell m}^+ \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) \times \hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} + b_{H\ell m}^+ \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^s) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\Theta'.6)$$

Συνεπώς, το σχεδάζόμενο κύμα ως άθροισμα επιπέδων κυμάτων γράφεται με τη μορφή:

$$\mathbf{E}_{sc}^s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{p}} [E_{sc}]_{\mathbf{g}\mathbf{p}}^s e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \quad (\Theta'.7)$$

όπου:

$$[E_{sc}]_{gp}^s = \sum_L \Delta_{L;p}(\mathbf{K}_g^s) b_L^+ \quad (\Theta'.8)$$

$\Delta\eta\lambda\alpha\delta\eta$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{sc}^s(\mathbf{r}) &= \sum_{gp} \sum_L \Delta_{L;p}(\mathbf{K}_g^s) b_L^+ e^{i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}_g^s) = \sum_{\mathbf{g}} \sum_L \Delta_L(\mathbf{K}_g^s) b_L^+ e^{i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}} = \\ &= \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\ell m} [\Delta_{Elm}(\mathbf{K}_g^s) b_{Elm}^+ e^{i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}} + \Delta_{Hlm}(\mathbf{K}_g^s) b_{Hlm}^+ e^{i\mathbf{K}_g^s \cdot \mathbf{r}}] \end{aligned} \quad (\Theta'.9)$$

όπου:

$$\begin{aligned} \Delta_{Elm}(\mathbf{K}_g^s) &= \frac{2\pi(-i)^\ell}{qA_0 K_{gz}^+ \sqrt{\ell(\ell+1)}} \left\{ i \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) - a_\ell^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_g^s) - \right. \\ &\quad \left. - \left[a_\ell^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_\ell^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_g^s) \right\} = \\ &= \frac{2\pi(-i)^\ell}{qA_0 K_{gz}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \times \hat{\mathbf{K}}_g^s \end{aligned} \quad (\Theta'.10)$$

και

$$\begin{aligned} \Delta_{Hlm}(\mathbf{K}_g^s) &= \frac{2\pi(-i)^\ell}{qA_0 K_{gz}^+ \sqrt{\ell(\ell+1)}} \left\{ \left[a_\ell^{-m} \cos \theta e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) - m \sin \theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_\ell^m \cos \theta e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}_g^s) + \right. \\ &\quad \left. + i \left[a_\ell^{-m} e^{i\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) - a_\ell^m e^{-i\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \right] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}_g^s) \right\} = \\ &= \frac{2\pi(-i)^\ell}{qA_0 K_{gz}^+} \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}_g^s) \end{aligned} \quad (\Theta'.11)$$

όπου θ, ϕ οι γωνιακές μεταβλητές του \mathbf{K}_g^s . Επομένως, αποδεικνύονται οι Εξ. (2.72) και (2.73).

Βιβλιογραφία

- ¹ J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed. (Wiley, 1999).
- ² D. J. Griffiths, *Εισαγωγή στην Ηλεκτροδυναμική*, 2η Έκδοση (Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 2017).
- ³ G. B. Arfken, H. J. Weber & F. E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, 6th ed. (Academic Press, Amsterdam, 2012).
- ⁴ K. Cahill, *Physical Mathematics* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2013)
- ⁵ C. F. Bohren & D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley, 1983)
- ⁶ N. Stefanou, V. Yannopoulos & A. Modinos, *Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients*, Comput. Phys. Commun. 113, 49 (1998)
- ⁷ N. Stefanou, V. Yannopoulos & A. Modinos, *MULTEM 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals*, Comput. Phys. Commun. 132, 189 (2000)
- ⁸ A. Gonis, *Green Functions for Ordered and Disordered Systems* (North-Holland, Amsterdam, 1992)
- ⁹ Χ. Τσερκέζης, *Εκπομπή και Διάδοση Φωτός σε Νανοδομημένα Πλασμονικά Μεταλλικά*, Διδακτορική Διατριβή (Αθήνα, 2012).
- ¹⁰ P. A. Pantazopoulos, *Controlling light with novel static and dynamic magnetophotonic structures*, PhD Thesis (Athens, 2020)
- ¹¹ N. Stefanou, V. Karathanos & A. Modinos, *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*, J. Phys.: Condens. Matter 4 7389 (1992)
- ¹² J. F. G. López, *An optical study of Opal based Photonic Crystals*, Doctoral Thesis (Madrid, 2005)
- ¹³ A. Toumazatou, M. K. Arfanis, P. A. Pantazopoulos, A. G. Kontos, P. Falaras, N. Stefanou & V. Likodimos, *Slow-photon enhancement of dye sensitized TiO₂ photocatalysis*, Materials Letters 197, 123 (2017)