Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Μελέτη χωρο-χρονικών περιοδικών μικροδομών για τον έλεγχο του φωτός με τη στρωματική μέθοδο πολλαπλής σκέδασης

Παναγιωτίδης Εμμανουήλ

Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας – 2ος Κύκλος» (ΜΙΣ-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).

Αθήνα 2023

Τριμελής συμβουλευτική επιτροπή

1. Παπανικολάου Νικόλαος, Ερευνητής Α', Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος» (Επιβλέπων)

2. Στεφάνου Νικόλαος, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ

3. Λυκοδήμος Βλάσιος, Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήματος Φυσικής, ΕΚΠΑ

Επταμελής εξεταστική επιτροπή

1. Γιαννόπαπας Βασίλειος, Καθηγητής, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ

2. Καφεσάκη Μαρία, Καθηγήτρια, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Κρήτης

3. Λυκοδήμος Βλάσιος, Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής, ΕΚΠΑ (μέλος Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής)

4. Μαυρόπουλος Φοίβος, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ

5. Παπανικολάου Νικόλαος, Ερευνητής Α', Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος»

6. Στεφάνου Νικόλαος, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ, (μέλος Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής)

7. Τσακμακίδης Κοσμάς, Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντά μου Νίκο Παπανικολάου για τη συνεχή του στήριξη και ουσιαστική βοήθεια που μου παρείχε σε όλη τη διάρκεια εκπόνησης του διδακτορικού μου. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή Νικόλαο Στεφάνου, μέλος της τριμελούς επιτροπής, ο οποίος έπαιξε καθοριστικό ρόλο όλα αυτά τα χρόνια. Ακόμα θα ήθελα να ευχαριστήσω και τον Λυκοδήμο Βλάσιο, επίσης μέλος της τριμελούς επιτροπής, που ήταν εκεί όποτε τον χρειάστηκα. Επιπροσθέτως, σημαντική ήταν και η συμβολή του Ευάγγελου Αλμπάνη, αφού από την πρώτη μέρα στάθηκε δίπλα μου και η συνεργασία μας ήταν άψογη όλα αυτά τα χρόνια. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για τη στήριξη και ειδικότερα τη γυναίκα μου Σοφία, που μοιραζόμασταν κοινές ανησυχίες, και την κόρη μου Ίριδα.

Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας – 2ος Κύκλος» (ΜΙΣ-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).

Περίληψη

Στην παρούσα διατριβή πραγματοποιήθηκε η θεωρητική μελέτη φωτονικών μεταϋλικών. Ειδικότερα αναπτύχθηκαν νέες μέθοδοι για τη μελέτη της αλληλεπίδρασης του φωτός με νανοδομημένες επιφάνειες που μεταβάλλονται περιοδικά στο χώρο, αλλά και το χρόνο. Τα μεταϋλικά είναι συστοιχίες από ειδικά σχεδιασμένους σκεδαστές και παρουσιάζουν εντυπωσιακή ηλεκτρομαγνητική απόκριση. Το δισδιάστατο αντίστοιχο των μεταϋλικών, η μεταεπιφάνεια είναι πολύ πιο εύκολο να κατασκευαστεί και να χρησιμοποιηθεί. Οι οπτικές μεταεπιφάνειες είναι στρώματα, που αποτελούνται από νανοδομές, με πάχος μικρότερο από το μήκος κύματος του φωτός και αλληλεπιδρούν έντονα με αυτό, με αποτέλεσμα να μεταβάλλουν δραματικά τις ιδιότητές του, κάτι που έχει ανοίξει το δρόμο για μια πληθώρα πρακτικών εφαρμογών. Αρκετές σύγχρονες νανοφωτονικές διατάξεις, στηρίζονται στην περιοδική οργάνωση των δομικών λίθων τους στη μίκρο-νάνο κλίμακα. Επεκτείνοντας την ιδέα της περιοδικότητας, επιπλέον, και στο βαθμό ελευθερίας του χρόνου, είναι εφικτό να εφευρεθούν νέες κατηγορίες τεχνητών υλικών, όπως οι φωτονικοί χωροχρονικοί κρύσταλλοι ή τα χωροχρονικά μεταϋλικά ή μεταεπιφάνειες. Η προσθήκη του επιπλέον βαθμού ελευθερίας, δίνει τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε συνηθισμένα διηλεκτρικά όπως το Si για να πετύχουμε ιδιότητες που εμφανίζονται μόνο σε μαγνητικά, ή μη γραμμικά αλλά και ενεργά υλικά. Η χρήση των χωροχρονικών υλικών μπορεί εντέλει να μας δώσει νέες δυνατότητες για έλεγχο του φωτός. Στο πρώτο μέρος της διδακτορικής διατριβής παρουσιάζεται μια επέκταση της μεθόδου πολλαπλής σκέδασης (LMS - Layer Multiple Scattering) που επιτρέπει την περιγραφή χωρικά περιοδικών δομών με πολλούς διαφορετικούς σκεδαστές ανά κυψελίδα. Με τη βοήθεια αυτής, μελετήθηκε η προοπτική χρήσης περιοδικών δομών από σωματίδια που εμφανίζουν πολυπολικούς συντονισμούς Mie στην ανάπτυξη μεταεπιφανειών που μπορούν να ελέγχουν το κυματομέτωπο κατά βούληση. Ένα πλέγμα αποτελούμενο από ασύμμετρα διμερή πυριτίου

μπορεί να καθοδηγήσει φως που προσπίπτει κάθετα στην επιφάνειά του, με διαφορετικούς τρόπους, όπως εκτροπή της ανάκλασης αλλά και της διέλευσης σε μεγάλες γωνίες, ή και διαχωρισμό της δέσμης ανάλογα με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της επιφάνειας. Για να γίνει αυτό χρησιμοποιήθηκαν διηλεκτρικά σωματίδια σε πολύ κοντινή απόσταση, στα οποία υπάρχει μεγάλη αλληλεπίδραση μεταξύ των πολυπολικών συντονισμών Mie, στο πλέγμα. Στο δεύτερο μέρος της διατριβής παρουσιάζεται μια επέκταση της θεωρίας Mie που περιγράφει τη σκέδαση από ένα σφαιρικό σκεδαστή με περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα, εφαρμόζοντας τη δυναμική μέθοδο Floquet. Η μελέτη έγινε σε συντονισμούς Mie υψηλής ποιότητας-Q, και υπολογίστηκαν τα φάσματα της ενεργού διατομής σκέδασης. Ουσιαστικά, πρόκειται για ένα πρόβλημα σύζευξης της ταλάντωσης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου με την ελαστική ταλάντωση της ακτίνας των σωματιδίων. Στην περιοχή ασθενούς αλληλεπίδρασης, δηλαδή για συχνότητες μεταβολής της ακτίνας μικρότερες από το ημιπλάτος του οπτικού συντονισμού, μπορεί να επιτευχθεί ισχυρή ασυμμετρία στις δέσμες Stokes, και anti-Stokes. Επιπλέον, στην περιοχή ισχυρής αλληλεπίδρασης, είναι δυνατό να εμφανιστούν φαινόμενα παραμετρικής σύζευξης, ενώ μελετήθηκε και η επίδραση της απόσβεσης στην ταλάντωση της ακτίνας. Στο τρίτο μέρος της διατριβής αναπτύχθηκε μια γενίκευση της φωτονικής μεθόδου LMS, η οποία μπορεί να περιγράφει περιοδικά πλέγματα από σφαιρικούς σκεδαστές, στους οποίους η διηλεκτρική σταθερά (ή η ακτίνα) μεταβάλλεται περιοδικά με το χρόνο. Μελετήθηκαν δισδιάστατα πλέγματα, που αποτελούνται από διηλεκτρικές σφαίρες υψηλού δείκτη διάθλασης, με περιοδικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά, στα οποία εμφανίζονται φαινόμενα ισχυρής μη ελαστικής σκέδασης, για συχνότητες κάτω από το όριο περίθλασης. Συγκεκριμένα, η ύπαρξη γειτονικών συντονισμών υψηλής ποιότητας, που προέρχονται από τους συντονισμούς Mie των μεμονωμένων σφαιρών, οι οποίοι μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση με την κατάλληλη επιλογή των γεωμετρικών παραμέτρων, επιτρέπει την πραγματοποίηση οπτικών μεταβάσεων. Αυτές μπορούν να εκδηλωθούν ως ισχυρή μη ελαστική σκέδαση, κάτω από κατάλληλες συνθήκες. Τα φαινόμενα μπορεί να είναι ενισχυμένα ακόμα και με μικρό πλάτος ταλάντωσης το οποίο μπορεί να επιτευχθεί πειραματικά ακόμα και στο υπέρυθρο. Η κατανόηση των οπτικών ιδιοτήτων των συστημάτων που μεταβάλλονται χρονικά, μπορεί να βοηθήσει στη δημιουργία νέων πρωτότυπων συσκευών.

Στο Κεφάλαιο 1, γίνεται μια αναφορά σε βασικές εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητισμού (ΗΜ) και παρουσιάζεται μια αναλυτική περιγραφή της σκέδασης ΗΜ κύματος από μεμονωμένο σκεδαστή, ειδικά για σωματίδια με σφαιρικό σχήμα. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης (LMS - Layer Multiple Scattering), με την οποία είναι δυνατόν να πραγματοποιηθεί μελέτη χωρικά περιοδικών μεταεπιφανειών. Αυτή στηρίζεται σε αντίστοιχη μέθοδο, η οποία χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ηλεκτρονικής δομής στερεών, των Korringa-Kohn-Rostocker (KKR). Η μέθοδος LMS δίνει τη δυνατότητα μελέτης των οπτικών ιδιοτήτων πολυστρωματικών δομών. Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται η επέκταση της μεθόδου που επιτρέπει την περιγραφή περιοδικών δομών με πολλούς διαφορετικούς σκεδαστές ανά κυψελίδα, αφού μέχρι τώρα υπήρχε η δυνατότητα προσθήκης μόνο ενός σκεδαστή στη βάση.

Στο Κεφάλαιο 2, με τη βοήθεια της βελτιωμένης LMS παρουσιάζεται μια αναλυτική μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων περιοδικών δομών από σφαίρες πυριτίου, δίνοντας κυρίως έμφαση στην αλληλεπίδραση μεταξύ των συντονισμών Mie των σφαιρών, αφού αυτή είναι η αιτία εμφάνισης ενδιαφερόντων φαινομένων, όπως για παράδειγμα τέλειας ανάκλασης ή ελεγχόμενης κατευθυντικής περίθλασης. Μελετήθηκαν περιπτώσεις μεταεπιφανειών που εμφανίζουν ισχυρή ανάκλαση ή διέλευση σε μεγάλες γωνίες. Τέλος, παρουσιάζεται και μια μέθοδος αντίστροφης σκέδασης, που επιτρέπει το σχεδιασμό μεταεπιφανειών με επιθυμητή οπτική απόκριση και παρουσιάζονται δύο ενδιαφέρουσες εφαρμογές.

Στο Κεφάλαιο 3, παρουσιάζεται η μελέτη της σκέδασης του φωτός από μια ομοιογενή διηλεκτρική σφαίρα με περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα. Ο πίνακας ανελαστικής σκέδασης T, ο οποίος περιγράφει το δυναμικά μεταβαλλόμενο σωματίδιο, υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη δυναμική μέθοδο Floquet. Συγκεκριμένα, μελετήθηκε η οπτική απόκριση μιας ομογενούς σφαίρας, με χαρακτηριστικά (διηλεκτρική σταθερά, μαγνητική διαπερατότητα) που αντιστοιχούν σε πυρίτιο της οποίας η ακτίνα εκτελεί ημιτονοειδή ταλάντωση. Η ταλάντωση της ακτίνας της σφαίρας εισάγει μια διαδικασία ανελαστικής σκέδασης που μελετήθηκε τόσο στο όριο της ασθενούς αλληλεπίδρασης, αλλά και της ισχυρής αλληλεπίδρασης. Επιπλέον, παρουσιάζεται και η μελέτη της επίδρασης της απόσβεσης στην ταλάντωση της ακτίνας της σφαίρας, η οποία προκαλεί μείωση στα φαινόμενα ανελαστικής σκέδασης.

Στο Κεφάλαιο 4, παρουσιάζεται μια γενίκευση της φωτονικής μεθόδου LMS, η οποία μπορεί να περιγράψει πλέγματα από σφαιρικούς σκεδαστές, στους οποίους η διηλεκτρική σταθερά (ή η ακτίνα) μεταβάλλεται περιοδικά με το χρόνο. Μελετήθηκαν δισδιάστατα πλέγματα, που αποτελούνται από διηλεκτρικές σφαίρες υψηλού δείκτη διάθλασης, με περιοδικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά, και αναδείχθηκε η εμφάνιση φαινομένων ισχυρής μη ελαστικής σκέδασης, για συχνότητες κάτω από το όριο περίθλασης. Συγκεκριμένα, η ύπαρξη γειτονικών συντονισμών υψηλής ποιότητας, που προέρχονται από τους συντονισμούς Mie των μεμονωμένων σφαιρών, οι οποίοι μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση με την κατάλληλη επιλογή των γεωμετρικών παραμέτρων, επιτρέπει την πραγματοποίηση οπτικών μεταβάσεων. Αυτές εκδηλώνονται ως ισχυρή μη ελαστική σκέδαση, όταν ικανοποιείται η συνθήκη του τριπλού συντονισμού, κατά την οποία η συχνότητα ταλάντωσης της ακτίνας είναι ίση με τη διαφορά των συχνοτήτων δύο οπτικών συντονισμών. Ο παραπάνω μηχανισμός οδηγεί σε ενισχυμένα φαινόμενα ακόμα και με μικρό πλάτος ταλάντωσης το οποίο μπορεί να επιτευχθεί πειραματικά ακόμα και στο υπέρυθρο.

Abstract

Title: *Study of space-time periodic microstructures for light control by the layer multiple scattering method.*

In this thesis, the theoretical study of photonic metamaterials was carried out. In particular, new methods were developed to study the interaction of light with nanostructured surfaces that change periodically in space, but also in time. The metamaterials are arrays of specially designed structures that exhibit an impressive electromagnetic response. The two-dimensional equivalent of metamaterials, the metasurface is much easier to build and use. Optical metasurfaces are layers, consisting of nanostructures, with thickness smaller than the wavelength of light and interact strongly with it, changing dramatically its properties. Several modern nanophotonic devices are based on the periodic organization of of their building blocks at the micro-nano scale. Extending the idea of periodicity to the degree of freedom of time, it is possible to invent new categories of artificial materials, such as photonic spatiotemporal crystals or spatiotemporal metamaterials or metasurfaces. Adding the extra degree of freedom, makes it possible to use ordinary dielectrics such as Si to achieve properties that appear only in magnetic, non-linear and active materials. The combination of space and time periodicity may ultimately give us new possibilities for controlling light. In the first part of the PhD thesis, an extension of the layer multiple scattering method (LMS) is presented, which allows the study of space periodic materials with many different scatterers per cell. Using this extension, we examined the prospect of using periodic structures consisting of particles exhibiting multipolar Mie resonances, in order to construct metasurfaces that control the wavefront at will. A lattice composed of asymmetric silicon dimers can

guide light, incident perpendicular to its surface, with different ways, such as deflection of reflection, but also of transmission, at large angles, or splitting the beam depending on the geometric characteristics of the surface. For this reason, dielectric particles were used at a very close distance, in which there is a large interaction between the multipolar Mie resonances, in the lattice. In the second part of the thesis, an extension of the Mie theory is presented, which describes the scattering from a spherical scatterer with a periodically time-varying radius, applying the dynamic Floquet method. The study was done in high quality-Q Mie resonances and the scattering cross section spectra were calculated. Essentially, this is a problem of coupling the oscillation of the electromagnetic field with the elastic one of the particle's radius. In the weak interaction regime, i.e. for radius change frequencies smaller than the optical half-width resonance, a strong asymmetry can be achieved in the Stokes, and anti-Stokes beams. Moreover, in the region of strong interaction, phenomena of parametric coupling may appear, while the effect of damping on the oscillation of the radius was also studied. In the third part of the thesis, a generalization of the photonic LMS method was developed, which can describe periodic lattices of spherical scatterers, in which the dielectric constant (or radius) varies periodically with time. Two-dimensional lattices, consisting of dielectric spheres with high refractive index, were studied, with a periodically varying dielectric constant, for frequencies below the diffraction limit. In this case, strong inelastic scattering phenomena can emerge. Specifically, optical transitions can be achieved due to the existence of high-quality neighboring resonances, originating from the Mie resonances of the individual spheres, which can be tuned at will, with the appropriate choice of the geometrical parameters. These can manifest as strong inelastic scattering, under certain conditions, which can be achieved experimentally even in infrared. Understanding the optical properties of time varying systems can lead to development of novel devices.

Συμμετοχή σε συνέδρια:

1. E. Panagiotidis, E. Almpanis, N. Stefanou and N. Papanikolaou, Poster presentation: Light Propagation in Time-Varying Environments using a Multipolar Multiple Scattering Method, 12-13 December (2022) OASIS 8, TelAviv, Israel
2. E. Panagiotidis, E. Almpanis, G. Zisis, N. Papanikolaou, Poster presentation: Controlling light wavefronts with dielectric meta-surfaces, 23-26 December (2019) 45th International Conference on Micro Nano Engineering, Rhodes, Greece
3. G. Zisis, E. Almpanis, E. Panagiotidis, I. Raptis, N. Papanikolaou, Poster presentation: Optical properties of aluminum nanosquare structures, 23-26 December (2019) 45th International Conference on Micro Nano Engineering, Rhodes, Greece
4. E. Almpanis, . Panagiotidis, N. Papanikolaou, P. A. Pantazopoulos, N. Stefanou, and K. L. Tsakmakidis, Oral Presentation: Metasurfaces and the control of light at the nanoscale, 15th International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies (NN18), 3- 6 July2018, Thessaloniki, Greece. [invited].

Άλλες παρουσιάσεις:

Παρουσιάσεις στην ετήσια Ημερίδα Υποψήφιων Διδακτόρων του Τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Τμήμα Φυσικής, ΕΚΠΑ :

[1] Διάδοση φωτός σε χρονικά μεταβαλλόμενα μέσα. 14 Ιουνίου 2022

[2] Σκέδαση φωτός από σφαίρα με χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα. 15 Ιουνίου 2021

[3] Μελέτη μεταεπιφανειών και αντίστροφη σχεδίαση με τη μέθοδο πολλαπλής σκέδασης. 19 Φεβρουαρίου 2020

[4] Διηλεκτρικές επιφάνειες για τον έλεγχο διάδοσης του φωτός. 8 Φεβρουαρίου 2019

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1

Στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης

1.1 Εισαγωγή

Τις τελευταίες δύο δεκαετίες, τα οπτικά μεταϋλικά [1, 2] έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον, λόγω των αξιοσημείωτων ηλεκτρομαγνητικών ιδιοτήτων τους. Τα μεταϋλικά είναι συστοιχίες από ειδικά σχεδιασμένους σκεδαστές και παρουσιάζουν εντυπωσιακή ηλεκτρομαγνητική απόκριση. Τέτοια παραδείγματα είναι δομές που εμφανίζουν δείκτη διάθλασης που μπορεί να είναι αρνητικός, [3, 4], μηδενικός [5] ή ακόμα και πολύ υψηλός [6, 7]. Το δισδιάστατο αντίστοιχο των μεταϋλικών, η μεταεπιφάνεια [8, 9, 10] είναι πολύ πιο εύκολο να κατασκευαστεί και να χρησιμοποιηθεί.

Οι οπτικές μεταεπιφάνειες είναι στρωματικές δομές με πάχος μικρότερο από το μήκος κύματος του φωτός αλληλεπιδρώντας έντονα με αυτό, με αποτέλεσμα να μεταβάλλουν δραματικά τις ιδιότητές του. Σε αντίθεση με τη συμβατική οπτική, όπου η διάδοση του φωτός καθορίζεται από τη διάθλαση σε μια διεπιφάνεια, οι μεταεπιφάνειες προσφέρουν μια θεμελιωδώς νέα μέθοδο χειρισμού του φωτός που βασίζεται στη σκέδαση από νανοδομές. Αυτές, μπορούν να συλλάβουν συντονισμένα το φως και να το εκπέμψουν ξανά με καθορισμένη φάση, πόλωση, συχνότητα, επιτρέποντας έτσι τον έλεγχο του κυματομετώπου με πρωτοφανή ακρίβεια. Αυτή η ικανότητα χειρισμού του φωτός στο επίπεδο της νανοκλίμακας έχει δώσει τη δυνατότητα πλήρους ελέγχου του κυματομετώπου και έχει ανοίξει το δρόμο για μια πληθώρα πρακτικών εφαρμογών, όπως τα φίλτρα συχνοτήτων, τον έλεγχο της πόλωσης, αλλά και την ανίχνευση της ακτινοβολίας [11].

Ανάμεσα στις πρώτες μελέτες ήταν μεταεπιφάνειες που αποτελούνταν από μεταλλικές (πλασμονικές) νανοδομές, όπως για παράδειγμα περιοδικά πλέγματα από νανοσωματίδια χρυσού πάνω σε υπόστρωμα οξειδίου του πυριτίου. Αυτές, χρησιμοποιήθηκαν για να στρίψουν τη δέσμη του φωτός [12, 13], μέσω του ελέγχου της φάσης του κύματος. Αυτά τα πρώτα αποτελέσματα, ενέπνευσαν τους επιστήμονες να δημιουργήσουν εξαιρετικά λεπτά οπτικά στοιχεία, συμβάλλοντας στην εξέλιξη του πεδίου των μεταεπιφανειών [13, 14]. Ωστόσο, λόγω των ισχυρών απωλειών Joule στις μεταλλικές νανοδομές που συνθέτουν τη μεταεπιφάνεια, οι πλασμονικές μεταεπιφάνειες έχουν φτάσει στο όριό τους στην απόδοση και την αποδοτικότητα τους.

Μια σημαντική εναλλακτική λύση εμφανίστηκε γρήγορα στη χρήση διηλεκτρικών νανοσωματιδίων ως δομικών στοιχείων της μεταεπιφάνειας. Τα διηλεκτρικά νανοσωματίδια παρουσιάζουν ισχυρούς συντονισμούς τύπου Mie τόσο ηλεκτρικού, όσο και μαγνητικού τύπου [15], όπου το μήκος κύματος συντονισμού εξαρτάται από το μέγεθος του σωματιδίου, το σχήμα και το υλικό. Στον συντονισμό, τα σωματίδια έχουν επαγόμενες ηλεκτρικές ή μαγνητικές διπολικές (ή υψηλότερης τάξης) ροπές, η αλληλεπικάλυψη των οποίων επηρεάζει έντονα την κατευθυντικότητα της σκέδασης. Για παράδειγμα, όταν ένα σωματίδιο εμφανίζει συντονισμό ηλεκτρικού και μαγνητικού τύπου στην ίδια περιοχή συχνοτήτων, το φως κατευθύνεται προς τα εμπρός και η οπισθοσκέδαση ελαχιστοποιείται, μέσω καταστροφικής συμβολής. Επομένως, η διέλευση φωτός μέσω μιας μεταεπιφάνειας που αποτελείται από τέτοια νανοσωματιδία μπορεί να είναι κοντά στη μονάδα, ενώ η φάση μπορεί να ποικίλλει σε όλο το εύρος, 0–2π [16].

Η κατασκευή των μεταεπιφανειών έχει βασιστεί σε μια σειρά από διηλεκτρικά υλικά υψηλού δείκτη διάθλασης, τα οποία προσφέρουν διαφορετικές ευκαιρίες αλλά και προκλήσεις. Οι νανοδομές από τις οποίες αποτελούνται οι μεταεπιφάνειες έχουν πάχος μικρότερο από το μήκος κύματος και η κατασκευή τους απαιτεί τη χρήση προηγμένων τεχνικών νανοκατασκευής (π.χ. λιθογραφία δέσμης ηλεκτρονίων). Το πιο σύνηθες υλικό επιλογής είναι σε μεγάλο βαθμό το πυρίτιο, το οποίο είναι συμβατό με τη διαδικασία κατασκευής ημιαγωγών, συγχωνεύοντας έτσι την κατασκευή ηλεκτρονικών τσιπ με το σχεδιασμό οπτικών συσκευών. Το μειονέκτημα της χρήσης πυριτίου είναι η χαμηλή του διαφάνεια στο ορατό φάσμα.

Στο παρόν κεφάλαιο θα γίνει μια αναλυτική παρουσίαση της στρωματικής μεθόδου πολλαπλής σκέδασης (LMS - Layer Multiple Scattering), με την οποία είναι δυνατόν να πραγματοποιηθεί μελέτη χωρικά περιοδικών μεταεπιφανειών. Αυτή στηρίζεται σε αντίστοιχη μέθοδο, η οποία χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ηλεκτρονικής δομής στερεών, η οποία έχει αναπτυχθεί από τους Korringa-Kohn-Rostocker (KKR) [17, 18]. Στη δική μας περίπτωση, η μέθοδος LMS μας δίνει τη δυνατότητα για τη μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων πολυστρωματικών δομών. Τέτοιες δομές μπορεί να είναι οι φωτονικοί κρύσταλλοι [19, 20, 21, 22], οι οποίοι εμφανίζουν πολλά ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά και αποτελούνται, συνήθως, από πολλές διαδοχικές στρώσεις σκεδαστών, με αποτέλεσμα να είναι εύκολο να εφαρμοστεί η μέθοδός μας. Επιπλέον, με τη μέθοδο πολλαπλής σκέδασης είναι δυνατόν να μελετηθούν και υλικά με διασπορά, όπως είναι τα μέταλλα, μιας και αυτή επιλύει τις εξισώσεις του Maxwell στο χώρο των συχνοτήτων. Αρχικά, η μέθοδος μπορούσε να χρησιμοποιηθεί μόνο για περιπτώσεις που η δομή περιλάμβανε, εκτός από ομογενή πλακίδια, και περιοδικά επίπεδα από σφαιρικούς σκεδαστές [23, 24, 25, 26], όπως για παράδειγμα φωτονικοί κρύσταλλοι που παρασκευάζονται με χημική σύνθεση κολλοειδών συστημάτων [27]. Από τότε έχουν γίνει πολλές βελτιώσεις και προσθήκες στη μέθοδο. Κάποιες από αυτές είναι οι εξής: Δυνατότητα προσθήκης σκεδαστών μη σφαιρικών [28, 29], κελύφη [30, 31], νανοδίσκοι [32], νανοκύβοι [33], νανοκεραίες [34], νανοσάντουιτς [35], χειρόμορφες ή γυροτροπικές δομές [36, 37], υπολογισμός ΗΜ πεδίου παντού στο χώρο [38] κ.α. Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε την επέκταση της μεθόδου που μας δίνει τη δυνατότητα της περιγραφής περιοδικών δομών με πολλούς διαφορετικούς σκεδαστές ανά κυψελίδα, αφού μέχρι τώρα υπήρχε η δυνατότητα υπολογισμού δισδιάστατων περιοδικών δομών με ένα σκεδαστή στη βάση.

Αρχικά, θα γίνει μια αναφορά σε βασικές εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητισμού (ΗΜ) και θα παρουσιαστεί μια αναλυτική περιγραφή της σκέδασης ΗΜ κύματος από μεμονωμένο σκεδαστή, ειδικά για σωματίδια με σφαιρικό σχήμα. Θα οριστεί ο πίνακας σκέδασης T και με τη βοήθεια αυτού θα υπολογιστούν η ενεργός διατομή σκέδασης, απορρόφησης και απόσβεσης. Η μελέτη του φαινομένου της σκέδασης (ειδικά από σφαίρες) και η περιγραφή αυτής με τη βοήθεια του πίνακα σκέδασης αποτελεί θεμέλιο της μεθόδου πολλαπλής σκέδασης.

1.2 Οι εξισώσεις του Maxwell

Οι σημαντικότερες εξισώσεις στο πεδίο του ηλεκτρομαγνητισμού στο μακρόκοσμο, συμπεριλαμβάνοντας και τη διάδοση του φωτός σε φωτονικούς κρυστάλλους, είναι οι εξισώσεις του Maxwell. Αυτές, στο σύστημα μονάδων SI, στην ύλη, δίνονται από τις τέσσερις παρακάτω εξισώσεις:

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

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

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

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

όπου τα $\mathbf{E}$ και $\mathbf{H}$ είναι το μακροσκοπικό ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο, αντίστοιχα, ενώ τα $\mathbf{D}$ και $\mathbf{B}$ είναι η ηλεκτρική μετατόπιση και η μαγνητική επαγωγή. Οι ποσότητες ρ και $\mathbf{j}$ αντιστοιχούν στην πυκνότητα των ελεύθερων φορτίων και του ρεύματος, αντίστοιχα. Μια κομψή απόδειξη των εξισώσεων αυτών μπορεί να βρει κάποιος στο βιβλίο του Jackson [39]. Αυτές οι τέσσερις εξισώσεις περιγράφουν πλήρως το ΗΜ πεδίο και θεωρούνται οι θεμελιώδεις εξισώσεις του ηλεκτρομαγνητισμού. Στην παρούσα διδακτορική διατριβή ασχολούμαστε με συστήματα στα οποία δεν υπάρχουν ελεύθερα φορτία ή ρεύματα, οπότε σε αυτές τις περιπτώσεις ισχύει $\rho = 0$ και $\mathbf{j} = \mathbf{0}$.

Η ηλεκτρική μετατόπιση και η μαγνητική επαγωγή, $\mathbf{D}$ και $\mathbf{B}$, συνδέονται με το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο μέσω εξισώσεων της μορφής

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{D}[\mathbf{E}\,,\,\mathbf{B}] \\ \mathbf{H} &= \mathbf{H}[\mathbf{E}\,,\,\mathbf{B}]\,. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Στις παραπάνω σχέσεις χρησιμοποιήσαμε τις αγκύλες για να δείξουμε ότι οι εξαρτήσεις με τα πεδία είναι σύνθετες, αφού μπορεί να είναι μη γραμμικές ή να συσχετίζονται με την υστέρηση του υλικού. Στην παρούσα διατριβή, θεωρούμε ότι η εξάρτηση είναι γραμμική και για ένα εν γένει ανισοτροπικό μέσο ισχύει:

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \epsilon\left(\mathbf{r}, t-t'\right) \mathbf{E}\left(\mathbf{r}, t'\right) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \mu_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \mu\left(\mathbf{r}, t-t'\right) \mathbf{H}\left(\mathbf{r}, t'\right),\end{aligned} \tag{1.6}$$

όπου ϵ_0 και μ_0 είναι η διηλεκτρική σταθερά και η μαγνητική διαπερατότητα του κενού, αντίστοιχα. Αυτές, συνδέονται με την ταχύτητα του φωτός c, μέσω της εξίσωσης $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$. Τα $\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\mu}$ είναι η σχετική διηλεκτρική συνάρτηση και η σχετική μαγνητική διαπερατότητα του υλικού που γενικά είναι τανυστές δεύτερης τάξης, όμως στη δική μας περίπτωση απλοποιούνται σε απλά βαθμωτά μεγέθη, αφού θα μελετήσουμε ισοτροπικά υλικά.

Αν κάνουμε τον μετασχηματισμό Fourier έχουμε

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r};\omega) &= \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r};\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r};\omega) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r};\omega) &= \mu_0 \mu(\mathbf{r};\omega)\mathbf{H}(\mathbf{r};\omega),\end{aligned} \tag{1.7}$$

όπου

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\mathbf{r},\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(i\omega t)\mathbf{F}(\mathbf{r};t), \quad \mathbf{F} = \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{E}, \mathbf{H} \\ f(\mathbf{r};\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) f(\mathbf{r},t), \quad f = \epsilon, \mu.\end{aligned} \tag{1.8}$$

Επιπλέον πρέπει να ισχύουν και οι παρακάτω σχέσεις

$$\begin{aligned}&\mathbf{F}(\mathbf{r};-\omega) = \mathbf{F}^*(\mathbf{r};\omega), \quad \mathbf{F} = \mathbf{D}, \mathbf{B}, \mathbf{E}, \mathbf{H} \\ &f(\mathbf{r};-\omega) = f^*(\mathbf{r};\omega), \quad f = \epsilon, \mu.\end{aligned} \tag{1.9}$$

Το σύμβολο $*$ δηλώνει τη μιγαδική συζυγία. Οι παραπάνω περιορισμοί πρέπει να ικανοποιούνται, αφού οι συναρτήσεις συσχέτισης και τα χωροχρονικά πεδία είναι πραγματικοί αριθμοί, ενώ οι μετασχηματισμένες είναι μιγαδικές ποσότητες.

Οι εξισώσεις του Maxwell (1.1)-(1.4) είναι γραμμικές. Γι΄ αυτό το λόγο το συνολικό πεδίο μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός μονοχρωματικών κυμάτων και, έτσι, είναι αρκετό να λύσουμε τις εξισώσεις του Maxwell για κάθε πεδίο συχνότητας ω με μορφή

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= [\mathbf{E}(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)]\\ \mathbf{H}(\mathbf{r},t) &= [\mathbf{H}(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)].\end{aligned} \tag{1.10}$$

1.3 Κυματικές εξισώσεις και επίπεδα κύματα

Όπως είδαμε παραπάνω, θεωρώντας ότι στο χώρο δεν υπάρχουν ελεύθερα φορτία και ρεύματα, οι εξισώσεις του Maxwell γράφονται

$$\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r};\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r})] = 0, \tag{1.11}$$

$$\nabla \cdot [\mu(\mathbf{r};\omega)\mathbf{H}(\mathbf{r})] = 0, \tag{1.12}$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega\mu_0\mu(\mathbf{r};\omega)\mathbf{H}(\mathbf{r}) \tag{1.13}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -i\omega\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r};\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}), \tag{1.14}$$

όπου δεν έχει συμπεριληφθεί η εξάρτηση από τη συχνότητα για λόγους συντομίας. Για να ικανοποιείται η εξίσωση (1.11), όταν το μέσο διάδοσης είναι ομοιογενές και ισότροπο, θα πρέπει

$$\epsilon(\omega) = 0 \quad \acute{\eta} \quad \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \tag{1.15}$$

Αρχικά θεωρούμε ότι $\epsilon(\omega) \neq 0$. Αν απαλείψουμε το $\mathbf{H}$ από τις Εξ. (1.13) και (1.14), προκύπτει

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mu_0\mu\epsilon_0\epsilon\omega^2\mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{1.16}$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2\mathbf{A}$ και την Εξ. (1.11), η (1.16) γίνεται

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mu_0\mu\epsilon_0\epsilon\omega^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \tag{1.17}$$

Αντίστοιχη εξίσωση ισχύει και για το $\mathbf{H}$.

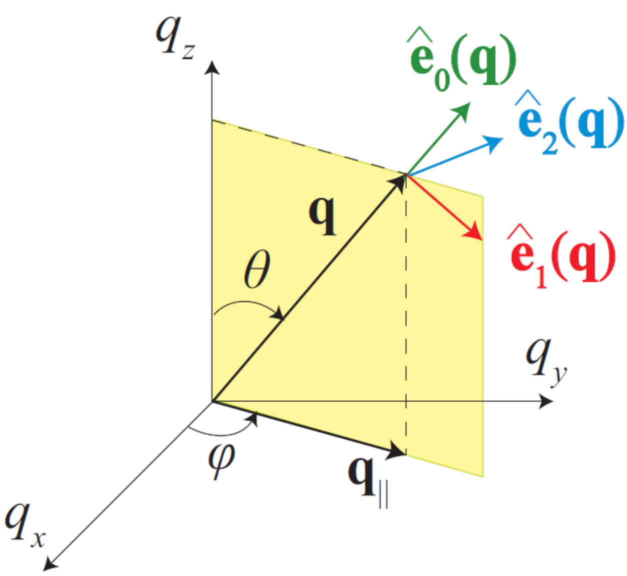
Οι λύσεις της Εξ. (1.17) μπορούν να γραφτούν στη βάση των επιπέδων κυμάτων με κυματάνυσμα $\mathbf{q}$ και μέτρο ίσο με $q = \sqrt{\epsilon\mu}\omega/c$.

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}p}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) \,, \tag{1.18}$$

και

$$\mathbf{H}_{\mathbf{q}p}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) \,, \tag{1.19}$$

όπου $\mathbf{E}_0(\mathbf{q}) = E_0(\mathbf{q})\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q})$ και $\mathbf{H}_0(\mathbf{q}) = H_0(\mathbf{q})\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q})$, με τα $\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{q})$, $p = 0, 1, 2$ να αντιστοιχούν στο ακτινικό, πολικό και αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, αντίστοιχα, για ένα δεδομένο διάνυσμα $\mathbf{q}$, και να καθορίζουν την πόλωση (Σχ. 1.1 [38]).



Σχήμα 1.1: Το σύστημα συντεταγμένων [38] για δεδομένο $\mathbf{q}$.

Οι παραπάνω λύσεις είναι τα εγκάρσια ΗΜ κύματα. Το διαμήκες κύμα, το οποίο αποτελεί λύση μόνο αν $\omega = 0$ και έχει $\hat{\mathbf{e}}_0(\mathbf{q}) = \hat{\mathbf{q}}$, δεν αποτελεί οδεύον κύμα.

1.4 Κυματικές εξισώσεις και σφαιρικά κύματα

Στο μεγαλύτερο μέρος της παρούσας διδακτορικής διατριβής θα ασχοληθούμε με τη σκέδαση ενός επίπεδου κύματος από δομές που αποτελούνται από σφαιρικούς σκεδαστές. Σε αυτές τις περιπτώσεις λόγω της σφαιρικής συμμετρίας των σωματιδίων, είναι χρήσιμο να γράψουμε τις λύσεις της κυματικής εξίσωσης στη μορφή διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων. Για να έχουμε ένα πλήρες σύνολο λύσεων της (1.16), πρέπει να συμπεριλάβουμε τα διαμήκη κύματα

$$\mathbf{J}_{L\ell mq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q}\nabla\left[j_\ell(qr)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right], \quad \mathbf{H}_{L\ell mq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q}\nabla\left[h_\ell^+(qr)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] \tag{1.20}$$

αλλά και τα εγκάρσια

$$\mathbf{J}_{H\ell mq}(\mathbf{r}) = j_\ell(qr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}), \quad \mathbf{H}_{H\ell mq}(\mathbf{r}) = h_\ell^+(qr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{1.21}$$

και

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{E\ell mq}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{q}\nabla\times j_\ell(qr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{i}{q}\nabla\times\mathbf{J}_{H\ell mq}(\mathbf{r}), \\ \mathbf{H}_{E\ell mq}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{q}\nabla\times h_\ell^+(qr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{i}{q}\nabla\times\mathbf{H}_{H\ell mq}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.22}$$

σε δοσμένη συχνότητα, όπου j_ℓ είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel και $\mathbf{X}_{\ell m}$ οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές, οι οποίες ορίζονται από τους όρους των γνωστών (βαθμωτών) σφαιρικών αρμονικών, $Y_{\ell m}(\mathbf{r})$, ως

$$\sqrt{\ell(\ell+1)}\mathbf{X}_{\ell m}(\mathbf{r}) = -i\mathbf{r}\times\nabla Y_{\ell m}(\mathbf{r}), \tag{1.23}$$

οι οποίες περιγράφονται αναλυτικά στο Παράρτημα Β′.

Όπως φαίνεται, οι Εξ. (1.20), (1.21), (1.22) καθορίζονται από το κυματάνυσμα q, τους γνωστούς δείκτες της στροφορμής ℓ, m και το δείκτη $P = L, E, H$, ο οποίος αναφέρεται στην πόλωση. Από εδώ και στο εξής θα χρησιμοποιούμε το σύμβολο L, για λόγους συντομίας, ο οποίος θα συμπεριλαμβάνει τους δείκτες $P\ell m$ και θα αναφέρεται στις μη τετριμμένες λύσεις, δηλαδή για $P = E, H$, $\ell = 1, \ldots, \infty$, $m = -\ell, \ldots, \ell$. Τέλος, είναι πολύ σημαντικό να τονιστεί ότι οι συναρτήσεις $\mathbf{J}$ είναι ομαλές σε όλα τα σημεία, ακόμα και στο $r = 0$. Αντίθετα, οι $\mathbf{H}$ απειρίζονται στο μηδέν, ενώ στην περίπτωση που $r \to \infty$, παίρνουν τη μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων. Έτσι, λοιπόν, είναι εύκολο να καταλάβει κάποιος γιατί τα πρώτα ($\mathbf{J}$) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να περιγράψουν ένα εισερχόμενο κύμα στο σημείο $r = 0$, ενώ τα δεύτερα ($\mathbf{H}$) είναι κατάλληλα για την περιγραφή ενός εξερχόμενου κύματος.

Ένα εγκάρσιο μονοχρωματικό κύμα (1.18), με συχνότητα ω, που διαδίδεται σε ομοιογενές μέσο μπορεί να γραφεί στη μορφή σφαιρικών κυμάτων.

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{L}} a^0_{\mathrm{L}} \mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) \,. \tag{1.24}$$

Στην παραπάνω εξίσωση δεν έχουμε συμπεριλάβει, για λόγους συντομίας, το δείκτη του κυματανύσματος $q = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$, μιας και, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η συχνότητα είναι πλήρως καθορισμένη. Το πρόβλημα, λοιπόν, ανάπτυξης ενός επίπεδου κύματος σε σφαιρικά, ανάγεται στο να βρεθούν οι συντελεστές a^0_{L}, που ονομάζονται συντελεστές τις σφαιρικής ανάπτυξης.

Για τους συντελεστές a^0_{L} ισχύει

$$a^0_{\mathrm{L}} = \mathbf{A}^0_{\mathrm{L}}(\hat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \,, \tag{1.25}$$

με τα διανύσματα $\mathbf{A}^0_{\mathrm{L}}(\hat{\mathbf{q}})$ να ορίζονται στο επίπεδο των $\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}), \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})$. Για να βρεθούν τα διανύσματα $\mathbf{A}^0_{\mathrm{L}}(\hat{\mathbf{q}})$ πρέπει να γίνει αντικατάσταση στην Εξ. (1.24), χρησιμοποιώντας το παρακάτω ανάπτυγμα [40]

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} i^\ell j_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}) \tag{1.26}$$

μαζί με τις σχέσεις που περιγράφονται στο παράρτημα Γ'. Λαμβάνοντας όλα τα παραπάνω υπόψη, οι εκφράσεις που προκύπτουν για τα $\mathbf{A}^0_{\mathrm{L}}(\hat{\mathbf{q}})$ είναι

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}^0_{H\ell m}(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\psi_\ell} \\
&\times \Big\{ \Big[\alpha_\ell^m \cos\theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin\theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \\
&+ \alpha_\ell^{-m} \cos\theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \Big] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \\
&+ i \Big[\alpha_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - \alpha_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \Big] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \Big\} \\
&= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}})
\end{aligned}
\tag{1.27}
$$

και

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}^0_{E\ell m}(\hat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^\ell (-1)^{m+1}}{\psi_\ell} \\
&\times \Big\{ i \Big[\alpha_\ell^m e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) - \alpha_\ell^{-m} e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \Big] \hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \\
&- \Big[\alpha_\ell^m \cos\theta e^{i\phi} Y_{\ell-m-1}(\hat{\mathbf{q}}) + m \sin\theta Y_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \\
&+ \alpha_\ell^{-m} \cos\theta e^{-i\phi} Y_{\ell-m+1}(\hat{\mathbf{q}}) \Big] \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q}) \Big\} \\
&= 4\pi i^\ell (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{q}}) \times \hat{\mathbf{q}},
\end{aligned}
\tag{1.28}
$$

όπου με $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ συμβολίζονται τα μοναδιαία διανύσματα, πολικό και αζιμουθιακό διάνυσμα, αντίστοιχα, που είναι κάθετα στο $\mathbf{q}$ στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων που ορίσαμε προηγουμένως [Σχ. (1.1)]. Με θ και ϕ αναφερόμαστε στις γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{q}$. Επιπλέον, τα ψ_ℓ και α_ℓ^m είναι

$$\psi_\ell = \sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{1.29}$$

και

$$\alpha_\ell^m = \frac{1}{2}[(\ell-m)(\ell+m+1)]^{1/2} \,. \tag{1.30}$$

Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι η η συνιστώσα z του $\mathbf{q}$, q_z, δεν είναι απαραίτητα πραγματική, αλλά, στην περίπτωση ενός κύματος που φθίνει, μπορεί να είναι και μιγαδική. Σε αυτή την περίπτωση αρκεί να αντικαταστήσουμε το $\cos\theta$ στις σχέσεις των $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}})$ (παράρτημα Β′) με q_z/q.

1.5 Σκέδαση από μεμονωμένο σκεδαστή

Θα συνεχίσουμε, μελετώντας τη σκέδαση από έναν μεμονωμένο σκεδαστή. Θα εισαχθεί η έννοια του πίνακα σκέδασης $\mathbf{T}$, ο οποίος αποτελεί θεμελιώδη γνώση στη μέθοδο πολλαπλής σκέδασης. Έστω ότι στην αρχή των αξόνων υπάρχει ένα ομοιογενές σωματίδιο τυχαίου σχήματος με σχετική διηλεκτρική συνάρτηση $\epsilon_{\mathbf{s}}$ και μαγνητική διαπερατότητα $\mu_{\mathbf{s}}$, οι οποίες μπορεί να είναι και μιγαδικές συναρτήσεις, εξαρτώμενες από την γωνιακή συχνότητα ω. Ο σκεδαστής βρίσκεται σε μέσο που χαρακτηρίζεται αντίστοιχα από ϵ, μ.

Θεωρούμε ότι στο σωματίδιο προσπίπτει επίπεδο κύμα, το οποίο γράφουμε στην αναπαράσταση των σφαιρικών κυμάτων [Εξ. (1.24)]

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{L}} a^0_{\mathrm{L}} \mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}). \tag{1.31}$$

Αν θέλουμε να περιγράψουμε το σκεδαζόμενο κύμα, τότε πρέπει να συμπεριλάβουμε μόνο τα σφαιρικά κύματα $\mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$, διότι για $r \to \infty$ παρουσιάζουν ασυμπτωτική μορφή $h^+_\ell(qr) \approx (-i)^\ell \exp(iqr)/iqr$. Το σκεδαζόμενο κύμα, λοιπόν, μπορεί να γραφεί

$$\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{L}} a^+_{\mathrm{L}} \mathbf{H}_{\mathrm{L}}, (\mathbf{r}). \tag{1.32}$$

Αντίθετα, στο χώρο μέσα στο σωματίδιο πρέπει να χρησιμοποιήσουμε σφαιρικά κύματα με ομαλή συμπεριφορά στην αρχή των αξόνων, δηλαδή

$$\mathbf{E}_{\mathrm{ins}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{L}} a^{\mathrm{ins}}_{\mathrm{L}} \mathbf{J}^{\mathrm{s}}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}). \tag{1.33}$$

Συνεπώς για τον υπολογισμό του συνολικού πεδίου έξω από το σωματίδιο έχουμε

$$\mathbf{E}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}). \tag{1.34}$$

Οι $\mathbf{J}^{\mathrm{s}}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$ προκύπτουν αν στις $\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$ [Βλ. Εξ. (1.21),(1.22)] αντικαταστήσουμε το $q = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$ με το $q_{\mathrm{s}} = \omega\sqrt{\epsilon_{\mathbf{s}}\mu_{\mathrm{s}}}/c$.

Σε αυτό το σημείο θα ορίσουμε τον πίνακα σκέδασης $\mathbf{T}$, ο οποίος συνδέει τους συντελεστές σφαιρικής ανάπτυξης του προσπίπτοντος κύματος με εκείνους του σκεδαζόμενου, a^+_{L} μέσω της σχέσης

$$a^+_{\mathrm{L}} = \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'} a^0_{\mathrm{L}'} \; . \tag{1.35}$$

Γενικά ο πίνακας σκέδασης $\mathbf{T}$ είναι μη διαγώνιος. Όμως στην περίπτωση που το σωματίδιο έχει σφαιρικό σχήμα, εμφανίζεται εκφυλισμός των καταστάσεων με τον ίδιο αριθμό στροφορμής ℓ για τις διάφορες τιμές του αζιμουθιακού αριθμού m, λόγω της συμμετρίας και έτσι ο πίνακας είναι διαγώνιος με στοιχεία $T_{P\ell}$. Σε αυτήν την περίπτωση μπορεί να γίνει αναλυτικός υπολογισμός [41, 42] του πίνακα σκέδασης.

Για να γίνει αυτό, πρέπει να εφαρμόσουμε τις συνθήκες συνέχειας των πεδίων πάνω στην επιφάνεια του σφαιρικού σκεδαστή. Συγκεκριμένα, πρέπει οι εφαπτομενικές συνιστώσες των $\mathbf{E}$ και $\mathbf{H}$ να είναι συνεχείς. Λαμβάνοντας υπόψη ότι τα $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$, $\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ είναι για κάθε ℓ, m και $\hat{\mathbf{r}}$ εφαπτομενικά στην επιφάνεια μιας σφαίρας, προκύπτουν οι παρακάτω συνοριακές συνθήκες

$$\mathbf{X}^*_{\ell m} \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}^*_{\ell m} \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{ins}}(\mathbf{r}) \tag{1.36}$$

$$(\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}) \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}) \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{ins}}(\mathbf{r}) \tag{1.37}$$

$$\mathbf{X}^*_{\ell m} \cdot \mathbf{H}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \mathbf{X}^*_{\ell m} \cdot \mathbf{H}_{\mathrm{ins}}(\mathbf{r}) \tag{1.38}$$

$$(\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}) \cdot \mathbf{H}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}) \cdot \mathbf{H}_{\mathrm{ins}}(\mathbf{r}) \tag{1.39}$$

για $\mathbf{r} = S\hat{\mathbf{r}}$ και για κάθε ℓ, m, όπου S η ακτίνα της σφαίρας.

Αν αντικαταστήσουμε τα σφαιρικά αναπτύγματα για το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο και κάνουμε την ολοκλήρωση των παραπάνω εξισώσεων σε όλη τη στερεά γωνία, παίρνουμε λύσεις της μορφής

$$a^+_{P\ell m} = T_{P\ell} a^0_{P\ell m} \tag{1.40}$$

με

$$T_{E\ell} = \left[\frac{j_\ell(q_s r)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(qr))\epsilon_s - j_\ell(qr)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(q_s r))\epsilon}{h_\ell^+(qr)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(q_s r))\epsilon - j_\ell(q_s r)\frac{\partial}{\partial r}\left(r h_\ell^+(qr)\right)\epsilon_s} \right]_{r=S}$$
$$T_{H\ell} = \left[\frac{j_\ell(q_s r)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(qr))\mu_s - j_\ell(qr)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(q_s r))\mu}{h_\ell^+(qr)\frac{\partial}{\partial r}(r j_\ell(q_s r))\mu - j_\ell(q_s r)\frac{\partial}{\partial r}\left(r h_\ell^+(qr)\right)\mu_s} \right]_{r=S}. \tag{1.41}$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας $\mathbf{T}$ είναι διαγώνιος. Από αυτό, προκύπτει η εξής σημαντική διαπίστωση: Ένας ομοιογενής σφαιρικός σκεδαστής δεν μεταβάλλει τους δείκτες ℓ και m. Δηλαδή, αν το προσπίπτον κύμα περιγράφεται από καθορισμένα ℓ και m, το σκεδαζόμενο κύμα από τη σφαίρα, θα έχει και αυτό τα ίδια ℓ και m.

1.6 Ενεργός διατομή σκέδασης και απορρόφησης

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή θα χρησιμοποιηθεί αρκετά συχνά η έννοια της ενεργούς διατομής σκέδασης. Αυτή ουσιαστικά είναι ένας τρόπος περιγραφής της σκέδασης με όρους ενέργειας. Συγκεκριμένα, ως ενεργός διατομή σκέδασης (απορρόφησης) ορίζεται ο λόγος της ροής ενέργειας που σκεδάζεται (απορροφάται) από το σκεδαστή, προς την προσπίπτουσα ροή ενέργειας του κύματος ανά μονάδα επιφάνειας.

Η ροή ενέργειας του προσπίπτοντος κύματος εκφράζεται από τη συνιστώσα του διανύσματος Poynting που είναι παράλληλη στη διεύθυνση διάδοσης του κυματομετώπου. Για ακτινοβολία δεδομένης συχνότητας, η μέση τιμή του Poynting, υπολογισμένη σε μία περίοδο, είναι

$$< \mathbf{S}(\mathbf{r}) > = \frac{1}{2}\,\mathrm{Re}\left[\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r})\right], \tag{1.42}$$

και η έκφραση της μέσης τιμή της ισχύος που διέρχεται από μια επιφάνεια S' είναι

$$P = \int_{S'} dS \hat{\mathbf{n}} \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle. \tag{1.43}$$

Για να βρεθεί η ροή ενέργειας του προσπίπτοντος κύματος κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης έχουμε [39]

$$< \mathbf{S}_0 > \cdot \hat{\mathbf{q}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}}\left|\mathbf{E}_0\right|^2. \tag{1.44}$$

Για την εύρεση της ισχύος της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας πρέπει να ολοκληρώσει κάποιος το διάνυσμα Poynting του πεδίου πάνω στην επιφάνεια S' της σφαίρας που περιβάλλει το σωματίδιο. Λαμβάνοντας υπόψη τις (1.32), (1.16) και τα Παραρτήματα Α′ και Β′ καταλήγουμε

$$P_{\mathrm{sc}} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})] = \frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_{\mathrm{L}} \left| a^+_{\mathrm{L}} \right|^2 . \qquad (1.45)$$

Από την αρχή διατήρησης της ενέργειας, είναι δυνατό να βρούμε την ενέργεια που απορροφάται από το σωματίδιο, αφού είναι ίση με το αντίθετο της ενέργειας που εκπέμπεται συνολικά από την περιβάλλουσα επιφάνεια, S' γύρω από τον σκεδαστή. Αυτή βρίσκουμε ότι είναι

$$P_{out} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*_{\mathrm{out}}(\mathbf{r})] = P_0 + P_{\mathbf{sc}} - P_{\mathrm{ext}}, \qquad (1.46)$$

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

$$P_{\mathrm{ext}} = -\frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_{S'} dS \hat{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*_0(\mathbf{r})] = -\frac{1}{2q^2} \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_{\mathrm{L}} \operatorname{Re} \left(a^+_{\mathrm{L}} a^{0*}_{\mathrm{L}} \right), \qquad (1.47)$$

η οποία είναι η ενέργεια απόσβεσης, που εκφράζει την αλληλεπίδραση του προσπίπτοντος με το σκεδαζόμενο πεδίο. Πάλι, λόγω της διατήρησης της ενέργειας ισχύει $P_{\mathrm{abs}} = P_{\mathrm{ext}} - P_{\mathrm{sc}}$. Δηλαδή, η ενέργεια απόσβεσης είναι η συνολική ενέργεια που μεταφέρεται από το εισερχόμενο κύμα προς το σκεδαστή. Λόγω των (1.35), (1.25) έχουμε

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathrm{sc}} &= \frac{1}{q^2} \sum_{\mathrm{L}} \left| \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'} A^0_{\mathrm{L}';p} \right|^2 \\ \sigma_{\mathrm{ext}} &= -\frac{1}{q^2} \operatorname{Re} \sum_{\mathrm{L}} \left(A^0_{\mathrm{L};p} \right)^* \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'} A^0_{\mathrm{L}';p}, \end{aligned} \qquad (1.48)$$

όπου η ενεργός διατομή απορρόφησης είναι $\sigma_{\mathrm{abs}} = \sigma_{\mathrm{ext}} - \sigma_{\mathrm{sc}}$ και ο δείκτης p αντιπροσωπεύει την πόλωση του εισερχόμενου κύματος [$p = 1(2)$, πόλωση $p(s)$]. Όπως φαίνεται η ενεργός διατομή εξαρτάται, εκτός από την πόλωση, και από την διεύθυνση διάδοσης του κύματος που προσπίπτει στο σκεδαστή.

1.7 Ενεργός διατομή εμπροσθοσκέδασης και οπισθοσκέδασης σφαίρας

Αν λάβουμε υπόψη τη σχέση (1.40), που ισχύει για μία σφαίρα, τότε η (1.48), μπορεί να γραφεί

$$\sigma_{\rm sc} = \frac{2}{q^2}\sum_{\ell=1}^{\infty}(2\ell+1)\left(|T_{E\ell}|^2 + |T_{H\ell}|^2\right). \tag{1.49}$$

Για να μελετήσει κάποιος τις συνθήκες της κατευθυντικής σκέδασης είναι απαραίτητο να καταλάβει ότι οι συντελεστές Mie αντιπροσωπεύουν τα πλάτη του σκεδαζόμενου κύματος όταν, για παράδειγμα,προσπίπτει ένα επίπεδο κύμα στη σφαίρα. Το σκεδαζόμενο κύμα μπορεί να αναλυθεί σε επί μέρους σφαιρικά πολυπολικά αναπτύγματα, που το καθένα έχει τη δική του συνεισφορά στο συνολικό κύμα, η οποία εξαρτάται από το αντίστοιχο πλάτος του κάθε πολυπόλου. Η κατανόηση όλης αυτής της διαδικασίας, δίνει τη δυνατότητα για τον έλεγχο του σκεδαζόμενου κύματος από μια μεμονωμένη σφαίρα, γι΄ αυτό και γίνεται η μελέτη αυτής, ακόμα και σήμερα στον τομέα της νανοτεχνολογίας.

Αν θέλουμε να υπολογίσουμε το ενεργό διατομή εμπροσθοσκέδασης ($\sigma_{\rm F}$) και οπισθοσκέδασης ($\sigma_{\rm B}$) παίρνουμε τις παρακάτω σχέσεις [43, 44], αντίστοιχα

$$\sigma_{\rm F} = \frac{1}{q^2}\left|\sum_{\ell=1}^{\infty}(2\ell+1)\left(T_{E\ell}+T_{H\ell}\right)\right|^2 \tag{1.50}$$

$$\sigma_{\rm B} = \frac{1}{q^2}\left|\sum_{\ell=1}^{\infty}(2\ell+1)(-1)^{\ell}\left(T_{E\ell}-T_{H\ell}\right)\right|^2. \tag{1.51}$$

Από τις παραπάνω δύο σχέσεις είναι φανερό ότι μπορεί κάποιος να πετύχει μηδενισμό της οπισθοσκέδασης, αν ικανοποιείται η συνθήκη

$$K_{\rm B} = T_{E\ell} - T_{H\ell} = 0, \tag{1.52}$$

ενώ μπορεί να πετύχει μηδενισμό της εμπροσθοκέδασης αν

$$K_{\rm F} = T_{E\ell} + T_{H\ell} = 0. \tag{1.53}$$

Οι παραπάνω δύο συνθήκες συνήθως αναφέρονται ως πρώτη και δεύτερη συνθήκη Kerker [45], αντίστοιχα. Πρέπει να τονιστεί ότι οι δύο παραπάνω συνθήκες δεν είναι ο μόνος τρόπος για να πετύχει κάποιος μηδενισμό της εμπροσθοσκέδασης ή της οπισθοσκέδασης, αλλά υπάρχουν και άλλοι περισσότερο περίπλοκοι [46]. Ένας από τους τρόπους με τον οποίο μπορούν να επιτευχθούν οι παραπάνω συνθήκες θα συζητηθεί εκτενέστερα στο επόμενο κεφάλαιο.

1.8 Σκέδαση από περιοδικό πλέγμα σφαιρών

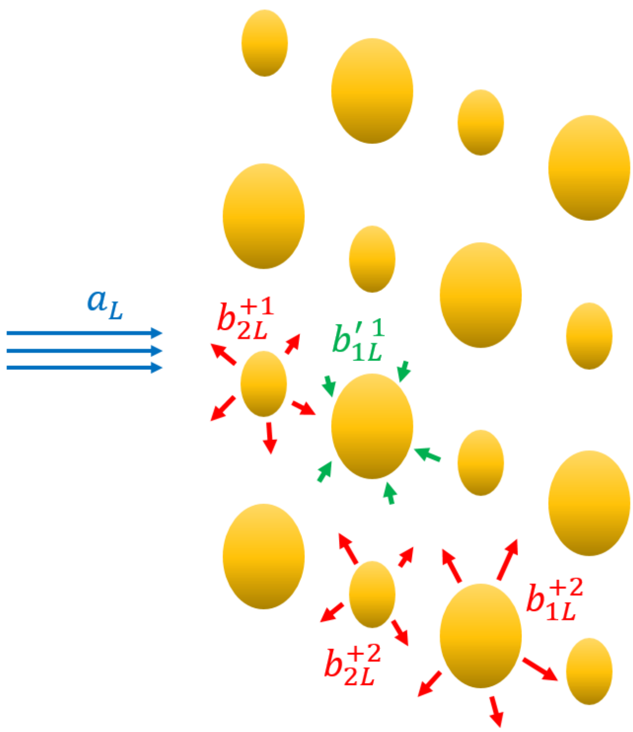
Στη συνέχεια, θα περιγράψουμε την σκέδαση φωτός από περιοδικό πλέγμα σκεδαστών με τη μέθοδο LMS. Με τη βοήθεια αυτής, είναι δυνατόν να επιλυθούν οι εξισώσεις του Maxwell σε πολυστρωματικές δομές από σκεδαστές που έχουν την ίδια δισδιάστατη περιοδικότητα και βρίσκονται μέσα σε ένα ομογενές μέσο. Αυτό γίνεται με τη χρήση σφαιρικών αναπτυγμάτων γύρω από τα κέντρα σκέδασης, λαμβάνοντας υπόψη όλες τις συνεισφορές που προκύπτουν από την πολλαπλή σκέδαση από όλους τους σκεδαστές (Σχ. 1.2). Η σκέδαση περιγράφεται από τον πίνακά σκέδασης σε ανάπτυξη επιπέδων κυμάτων, μετά από μετασχηματισμό από τη σφαιρική ανάπτυξη. Αυτή η προσέγγιση είναι πάρα πολύ αποδοτική σε προβλήματα σκέδασης από περιοδικά επίπεδα σκεδαστών, των οποίων το σχήμα δεν αποκλίνει πολύ από το σφαιρικό [47]. Στη συνέχεια θα γίνει η αναλυτική μαθηματική περιγραφή της επέκτασης της παραπάνω μεθόδου, με την οποία θα είναι δυνατόν το κάθε κέντρο σκέδασης να αποτελείται από περισσότερους από έναν σκεδαστές ανά κυψελίδα.

Θεωρούμε ένα δισδιάστατο περιοδικό πλέγμα στο επίπεδο x-y με σκεδαστές στις θέσεις $\mathbf{R}_{n\beta} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\beta$, όπου $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$ είναι οι μετατοπίσεις του πλέγματος Bravais, με n_1, n_2 ακέραιους, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ τα θεμελιώδη διανύσματα του πλέγματος και τα $\mathbf{r}_\beta$ είναι τα ανύσματα βάσης. Το αντίστροφο πλέγμα ορίζεται αντίστοιχα

$$\mathbf{g} = m_1\mathbf{b_1} + m_2\mathbf{b_2}, \tag{1.54}$$

όπου m_1, m_2 είναι ακέραιοι και $\mathbf{b_1}, \mathbf{b_2}$ είναι τα θεμελιώδη διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος για τα οποία ισχύει

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \qquad i, j = 1, 2. \tag{1.55}$$



Σχήμα 1.2: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου LMS. Το εισερχόμενο κύμα στο σκεδαστή 1 αποτελείται από το σκεδαζόμενο από τα υπόλοιπα σωματίδια και το εξωτερικά προσπίπτον πεδίο.

Ένα επίπεδο μονοχρωματικό ΗΜ κύμα με γωνιακή συχνότητα ω και κυματάνυσμα $\mathbf{q}$ ($q = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$, όπου c η ταχύτητα του φωτός στο κενό) που προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών έχει τη μορφή

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r},t) = [E_{\text{in}}]^{s'}_{\mathbf{g}'p'}\, e^{(i\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{r})}\hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \exp\left(-i\omega t\right) = \\ \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \exp\left(-i\omega t\right),\end{aligned} \tag{1.56}$$

όπου το p αναφέρεται στην πολική και αζιμουθιακή συνιστώσα του πεδίου και το $s' = +(-)$ αν το κύμα προσπίπτει από αριστερά (δεξιά) της δομής.

Οι δομές που μελετάμε είναι δισδιάστατες στο επίπεδο xy που είναι κάθετο στο z και μας διευκολύνει να γράψουμε την παράλληλη στο xy επίπεδο συνιστώσα του κυματανύσματος του προσπίπτοντος κύματος στη μορφή $\mathbf{q}_{\|} = \mathbf{k}_{\|} + \mathbf{g}'$, με το $\mathbf{g}'$ να είναι κατάλληλο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος, ώστε το $\mathbf{k}_{\|}$ να είναι η παράλληλη συνιστώσα του κυματανύσματος στο επίπεδο των σκεδαστών, ανηγμένο στην πρώτη ζώνη Brillouin. Έτσι, έχουμε ορίσει

$$\mathbf{K}^{\pm}_{\mathbf{g}'} \equiv \mathbf{k}_{\|} + \mathbf{g}' \pm \left[q^2 - (\mathbf{k}_{\|} + \mathbf{g}')^2\right]^{1/2} \hat{\mathbf{e}}_z\ . \tag{1.57}$$

Στην Εξ.(1.56) τα $\hat{\mathbf{e}}_{p'}$ αντιστοιχούν στην πολική ($p' = 1$, πόλωση TM) ή την αζιμουθιακή ($p' = 2$, πόλωση TE) συνιστώσα του πεδίου, οι οποίες είναι κάθετες στο $\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}$ (Σχ.1.1). Το ίδιο ισχύει για οποιοδήποτε $\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}$ που προκύπτει για δεδομένο ω και $\mathbf{k}_{\|}$ για κάθε $\mathbf{g}$. Στην περίπτωση που $\left(\mathbf{k}_{\|} + \mathbf{g}\right)^2 > q^2$ το κύμα φθίνει εκθετικά στα δεξιά για $s = +$ ή στα αριστερά για $s = -$, ενώ τα μοναδιαία $\hat{\mathbf{e}}_p$ είναι μιγαδικοί αριθμοί. Για τα $\hat{\mathbf{e}}_p$ ισχύει

$$\hat{\mathbf{e}}_1\left(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\right) = \cos\theta\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_x + \cos\theta\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_y - \sin\theta\hat{\mathbf{e}}_z \tag{1.58}$$

και

$$\hat{\mathbf{e}}_2\left(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\right) = -\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_x + \cos\phi\hat{\mathbf{e}}_y, \tag{1.59}$$

όπου θ και ϕ είναι οι γωνιακές συνιστώσες του $\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}$, όπως μπορούμε να δούμε και στο Σχ.1.1. Όταν το κύμα φθίνει είναι φανερό ότι η z συνιστώσα του $\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}$ είναι φανταστική, αλλιώς είναι πραγματική. Στην πρώτη περίπτωση, στην Εξ.(1.58) εμφανίζονται τα $K^{s}_{\mathbf{g};z}/q$ και $\left|\mathbf{k}_{\|} + \mathbf{g}\right|/q$ στη θέση των $\cos\theta$ και $\sin\theta$, αντίστοιχα και γι΄ αυτό το $\hat{\mathbf{e}}_1$ είναι μιγαδικό.

Το εισερχόμενο κύμα μπορεί να γραφεί σε ανάπτυγμα σφαιρικών κυμάτων γύρω από ένα κέντρο ανάπτυξης των σκεδαστών στη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$

$$\mathbf{E}_{\mathrm{in}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta},t)=\sum_{\mathrm{L}} a_{\beta\mathrm{L}}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta})\exp\left(-i\omega t\right), \tag{1.60}$$

όπου ο δείκτης L αναφέρεται στους δείκτες $P\ell m$, δηλαδή για $P=E,H$, $\ell=1,\ldots,\infty$, $m=-\ell,\ldots,\ell$. Οι συντελεστές σφαιρικής ανάπτυξης $a_{\beta\mathrm{L}}$ συνδέονται με εκείνους των επιπέδων κυμάτων μέσω της σχέσης

$$a_{\beta\mathrm{L}}=\sum_{p'=1}^{2} A_{\beta\mathrm{L};p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})[E_{\mathrm{in}}]^{s'}_{\mathbf{g}'p'} \tag{1.61}$$

με τα $A_{\beta\mathrm{L}}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})$ να είναι [25, 26, 48]:

$$A_{\beta H\ell m}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})=4\pi i^{\ell}(-1)^{m+1}\exp(i\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{r}_{\beta})\mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{K}}^{s'}_{\mathbf{g}'})\cdot\hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \tag{1.62}$$

$$A_{\beta E\ell m}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})=4\pi i^{\ell}(-1)^{m+1}\exp(i\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{r}_{\beta})[\mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{K}}^{s'}_{\mathbf{g}'})\times\hat{\mathbf{K}}^{s'}_{\mathbf{g}'}]\cdot\hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}). \tag{1.63}$$

Για ένα προσπίπτον κύμα της μορφής (1.60), το σκεδαζόμενο κύμα θα γράφεται ως άθροισμα εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων με κέντρα τις θέσεις $\mathbf{R}_{n'\beta'}$ των σκεδαστών του επιπέδου, δηλαδή

$$\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta},t)=\sum_{\mathbf{R}_{n'\beta'}} e^{i\mathbf{k}_{\|}\cdot(\mathbf{R}_{n}-\mathbf{R}_{n'})}\sum_{\mathrm{L}'} b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'}\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'\beta'})\exp\left(-i\omega t\right). \tag{1.64}$$

Οι συντελεστές $b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'}$ που σχετίζονται με το σκεδαζόμενο κύμα από το σκεδαστή στη θέση $\mathbf{R}_{n'\beta'}$, μπορούν να βρεθούν από το ολικό προσπίπτον σε αυτόν κύμα, το οποίο αποτελείται από το εισερχόμενο κύμα και το άθροισμα των σκεδαζόμενων κυμάτων από όλους τους σκεδαστές του επιπέδου $\mathbf{E}'_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})$. Αν αναφερθούμε στο σκεδαστή στη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$ πρέπει από το συνολικά σκεδαζόμενο κύμα αφαιρέσουμε το εξερχόμενο από τη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$.

Ο σκοπός μας είναι να γράψουμε το συνολικό εξερχόμενο κύμα από τις θέσεις $\mathbf{R}_{n'\beta'}$, που το καθένα γράφεται

$$\mathbf{E}'_{\mathrm{sc}}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'\beta'}\right)=\sum_{\mathrm{L}'} b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'}\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'\beta'}\right) \tag{1.65}$$

ως εισερχόμενο με κέντρο τη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$, δηλαδή

$$\mathbf{E}'_{\mathrm{in}}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta}\right)=\sum_{\beta',\mathrm{L}} b'_{\beta'\mathrm{L}}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta}). \tag{1.66}$$

Για να γίνει αυτό χρησιμοποιούμε την ταυτότητα (Παράρτημα Δ′):

$$\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'\beta'})=\sum_{\mathrm{L}}\Omega^{n\beta,n'\beta'}_{\mathrm{LL}'}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta}). \tag{1.67}$$

Έτσι η σχέση (1.64) γίνεται:

$$\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta},t)=\sum_{\mathbf{R}_{n'\beta'}}\sum_{\mathrm{L},\mathrm{L}'} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot(\mathbf{R}_{n'}-\mathbf{R}_{n})}b^{+\nu}_{\beta'\mathrm{L}'}\Omega^{n\beta,n'\beta'}_{\mathrm{LL}'}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta})\exp\left(-i\omega t\right). \tag{1.68}$$

Εισάγοντας το μετασχηματισμό *Fourier* των διαδοτών που δίνεται από την παρακάτω σχέση

$$\Omega_{\beta\mathrm{L},\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel})=\sum_{R_{n'}}\Omega^{n\beta,n'\beta'}_{\mathrm{LL}'}e^{-i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot(\mathbf{R}_{n}-\mathbf{R}_{n'})} \tag{1.69}$$

με

$$\Omega^{n\beta,n'\beta'}_{LL'}=\frac{1}{S}\int_{SBZ}d^{2}\mathbf{k}_{\parallel}e^{i\mathbf{k}_{\parallel}(\mathbf{R}_{n}-\mathbf{R}_{n'})}\Omega_{\beta L,\beta' L'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tag{1.70}$$

η (1.68) γίνεται

$$\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta},t)=\sum_{\mathrm{L},\mathrm{L}',\beta'}\Omega_{\beta\mathrm{L},\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel})b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta})\exp\left(-i\omega t\right). \tag{1.71}$$

Λαμβάνοντας υπόψη την (1.66) βρίσκουμε

$$b'_{\beta\mathrm{L}}=\sum_{\mathrm{L}',\beta'}\Omega_{\beta\mathrm{L},\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel})b^{+}_{\beta\mathrm{L}'}\ . \tag{1.72}$$

Ο συντελεστής $b'_{\beta\mathrm{L}}$ ουσιαστικά αντιπροσωπεύει το εισερχόμενο κύμα στη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$ λόγω των εξερχόμενων κυμάτων από όλους τους υπόλοιπους σκεδαστές. Τελικά η (1.71) γίνεται:

$$\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta},t)=\sum_{\mathrm{L}} b'_{\beta\mathrm{L}}\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n\beta})\exp\left(-i\omega t\right). \tag{1.73}$$

Οι συντελεστές $b^{+}_{\beta\mathrm{L}}$ για το σκεδαστή στη θέση $\mathbf{R}_{n\beta}$ μπορούν να βρεθούν από τη σχέση

$$b^{+}_{\beta\mathrm{L}}=\sum_{\mathrm{L}'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}\left(a_{\beta\mathrm{L}'}+b'_{\beta\mathrm{L}'}\right). \tag{1.74}$$

Η σχέση (1.74) λαμβάνει υπόψη το αρχικά εισερχόμενο κύμα μέσω των συντελεστών $a_{\beta\mathrm{L}'}$, αλλά και το εισερχόμενο λόγω των υπόλοιπων σκεδαστών μέσω των όρων $b'_{\beta\mathrm{L}'}$. Τα $T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}$ είναι τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα σκέδασης όλων των σκεδαστών, που στη διαγώνιο του έχει τους επιμέρους πίνακες σκέδασης των μεμονωμένων σκεδαστών (όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο) και τα υπόλοιπα στοιχεία μηδέν, δηλαδή $\delta_{\beta\beta'}T^{\beta\beta'}_{\mathrm{LL}'}$.

Από τις (1.72) και (1.74) παίρνουμε

$$\begin{aligned} b^{+}_{\beta\mathrm{L}} =&\sum_{\mathrm{L}'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}a_{\beta\mathrm{L}'}\delta_{\nu''\nu'}+\sum_{\mathrm{L}',\beta'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}\sum_{\mathrm{L}''}\Omega_{\beta\mathrm{L}',\beta'\mathrm{L}''}(\mathbf{k}_{\parallel})b^{+}_{\beta'\mathrm{L}''}= \\ &\sum_{\mathrm{L}'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}a_{\beta\mathrm{L}'}+\sum_{\mathrm{L}',\mathrm{L}'',\beta'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}''}\Omega_{\beta\mathrm{L}'',\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel})b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'} \end{aligned} \tag{1.75}$$

και τελικά καταλήγουμε στη σχέση

$$\sum_{\mathrm{L}'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'}a_{\beta\mathrm{L}'}=\sum_{\mathrm{L}',\beta'}\left[\delta_{\mathrm{LL}'}\delta_{\beta\beta'}-\sum_{\mathrm{L}'',\beta'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}''}\Omega_{\beta\mathrm{L}'',\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\parallel})\right]b^{+}_{\beta'\mathrm{L}'}. \tag{1.76}$$

Έτσι λοιπόν από τη σχέση (1.76) είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι συντελεστές σκέδασης $b^{+}_{\beta\mathrm{L}}$ που εξαρτώνται από τη γεωμετρία, τις διηλεκτρικές σταθερές και από το δυναμικό πίνακα σκέδασης των σφαιρών. Λόγω της εξίσωσης (1.76) και της (1.61) μπορούμε να γράψουμε

$$b^{+}_{\beta\mathrm{L}}=\sum_{p'=1}^{2} B^{+}_{\beta\mathrm{L};p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})\,[E_{\mathrm{in}}]^{s'}_{\mathbf{g}'p'}. \tag{1.77}$$

Συνεπώς η (1.76) μπορεί να γραφεί

$$\sum_{\mathrm{L}'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}'} A_{\beta\mathrm{L};p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) = \sum_{\mathrm{L}',\beta'} \left[\delta_{\mathrm{LL}'}\delta_{\beta\beta'} - \sum_{\mathrm{L}'',\beta'} T^{\beta\beta}_{\mathrm{LL}''}\Omega_{\beta\mathrm{L}'',\beta'\mathrm{L}'}(\mathbf{k}_{\|})B^{+}_{\beta'\mathrm{L}';p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}).\right. \tag{1.78}$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα για όλα τα $\beta\mathrm{L}p$ και για κάθε $\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}$ μπορούν να βρεθούν οι συντελεστές $B^{+}_{\beta\mathrm{L};p}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})$ και με τη βοήθεια αυτών να γραφεί το σκεδαζόμενο κύμα σε ανάπτυξη επίπεδων κυμάτων δηλαδή

$$\mathbf{E}^{s}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathbf{sc}}]^{s}_{\mathbf{g}p}\, e^{(i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\mathbf{r})}\, \hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}})\ , \tag{1.79}$$

αφού οι συντελεστές $[E_{\mathbf{sc}}]^{s}_{\mathbf{g}p}$ είναι [25, 26, 48]:

$$[E_{\mathbf{sc}}]^{s}_{\mathbf{g}p} = \sum_{\beta,\mathrm{L}} \Delta^{\beta\mathrm{L}}_{s\mathbf{g}p'} B^{+}_{\beta\mathrm{L};p}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}), \tag{1.80}$$

με

$$\Delta^{\beta H\ell m}_{sp\mathbf{g}} = \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{qA_0K^{+}_{\mathbf{g};z}} \exp(-i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r}_{\beta})\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})\cdot\hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}) \tag{1.81}$$

$$\Delta^{\beta E\ell m}_{sp\mathbf{g}} = \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{q^2A_0K^{+}_{\mathbf{g};z}} \exp(-i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r}_{\beta})[\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})\times\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}}]\cdot\hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}) \tag{1.82}$$

όπου A_0 είναι η επιφάνεια της μοναδιαίας κυψελίδας. Στα $\mathbf{K}^{\pm}_{\mathbf{g}}$ το + (-) ισχύει για $z > 0$ ($z < 0$), ενώ το $K^{\pm}_{\mathbf{g};z}$ μπορεί να είναι πραγματικός ή φανταστικός αριθμός. Στη δεύτερη περίπτωση στη θέση του $\cos\theta$ στις εκφράσεις των $Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{K}}^{\pm}_{\mathbf{g}}\right)$ βάζουμε το $K^{\pm}_{\mathbf{g};z}/q$.

Ας υποθέσουμε ότι το κύμα πέφτει από αριστερά προς τα δεξιά, δηλαδή ότι $s' = +$. Σε αυτήν την περίπτωση το συνολικά διερχόμενο κύμα, που αποτελείται από το προσπίπτον και το σκεδαζόμενο προς τα δεξιά, θα είναι

$$\mathbf{E}^{+}_{\mathrm{tr}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}p}\, e^{(i\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r})}\, \hat{\mathbf{e}}_{p}(\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}})\ , \tag{1.83}$$

με

$$[E_{\rm tr}]^{+}_{\mathbf{g}p} = [E_{\rm in}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\,\delta_{pp'}\delta_{\mathbf{gg}'} + [E_{\rm sc}]^{+}_{\mathbf{g}p} = S^{++}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}\,[E_{\rm in}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\,. \tag{1.84}$$

Στην παραπάνω περίπτωση για το ανακλώμενο κύμα θα ισχύει

$$\mathbf{E}^{-}_{\rm rf}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}p} [E_{\rm rf}]^{-}_{\mathbf{g}p}\, e^{\left(iK^{-}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r}\right)}\hat{\mathbf{e}}_p\left(\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}}\right), \quad z<0 \tag{1.85}$$

με

$$[E_{\rm rf}]^{-}_{\mathbf{g}p} = [E_{\rm sc}]^{-}_{\mathbf{g}p} = S^{-+}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}\,[E_{\rm in}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\,. \tag{1.86}$$

Από τις παραπάνω σχέσεις (1.84), (1.86) ουσιαστικά ορίζονται τα στοιχεία των πινάκων $S^{++}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}, S^{-+}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}$, που περιγράφουν τη διέλευση και την ανάκλαση αντίστοιχα ενός κύματος που προσπίπτει από τα αριστερά της δομής. Για να καταλήξουμε στην τελική μορφή των πινάκων συνδυάζουμε και τις Εξ. (1.80) και (1.61). Με παρόμοιο τρόπο μπορούν να υπολογιστούν και οι αντίστοιχοι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης $S^{--}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}$ και $S^{+-}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}$ αντίστοιχα για πρόσπτωση από δεξιά και έτσι έχουμε την γενική σχέση για τους πίνακες S

$$S_{sp\mathbf{g},s'p'\mathbf{g}'} = \delta_{ss'}\delta_{pp'}\delta_{\mathbf{gg}'} + \sum_{\mathrm{L},\beta}\Delta^{\beta\mathrm{L}}_{sp\mathbf{g}}B^{+}_{\beta\mathrm{L};p}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}). \tag{1.87}$$

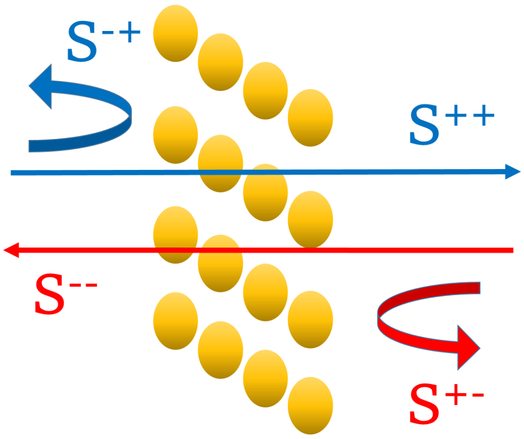
Στο Σχ. 1.3 φαίνεται μια γραφική αναπαράσταση της φυσικής σημασίας των πινάκων **S**. Για ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο πλέγμα των σκεδαστών, για παράδειγμα αν διαδίδεται προς τη θετική κατεύθυνση του άξονα z με κυματάνυσμα $\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}'}$ και πόλωση p', η συνολική διέλευση και ανάκλαση δίνονται από (θα εξηγηθεί πιο αναλυτικά στο αμέσως επόμενο εδάφιο γενικά για πολυστρωματική δομή -Εξ.(1.97))

$$\mathcal{T} = \sum_{p\mathbf{g}} |S_{+p\mathbf{g},+p'\mathbf{g}'}|^2 \frac{K^{+}_{\mathbf{g}z}}{K^{+}_{\mathbf{g}'z}} \tag{1.88}$$

και

$$\mathcal{R} = \sum_{p\mathbf{g}} |S_{-p\mathbf{g},+p'\mathbf{g}'}|^2 \frac{K^{+}_{\mathbf{g}z}}{K^{+}_{\mathbf{g}'z}}\,, \tag{1.89}$$

αντίστοιχα, ενώ η απορρόφηση υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψιν την αρχή διατήρησης της ενέργειας, δηλαδή $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R}$.



Σχήμα 1.3: Σχηματική αναπαράσταση της φυσικής σημασίας των πινάκων $\mathbf{S}$ για ένα επίπεδο σκεδαστών.

1.9 Σκέδαση από πολυστρωματική δομή

Στη μέθοδο LMS είναι δυνατόν να μελετηθούν δομές που χτίζονται στρωματικά, δηλαδή που αποτελούνται από πολλά διαδοχικά επίπεδα κατά μήκος του άξονα z. Τα στρώματα αυτά μπορεί να είναι είτε περιοδικά επίπεδα σκεδαστών (με ίδια περιοδικότητα) σε ομοιογενές μέσον, είτε διαχωριστικές επιφάνειες μεταξύ δύο διαφορετικών ομοιογενών μέσων, είτε ομοιογενή πλακίδια. Όπως δείξαμε προηγουμένως μπορεί να υπολογιστεί, για κάθε επίπεδο, ο αντίστοιχος πίνακας σκέδασης, ο οποίος περιγράφει τη σκέδαση, μεμονωμένα, από το συγκεκριμένο επίπεδο. Για να μπορέσει κάποιος να περιγράψει τη σκέδαση από την πολυστρωματική δομή είναι απαραίτητο να γράψει τα επίπεδα κύματα αριστερά και δεξιά ενός επιπέδου, ως προς ένα σημείο στα αριστερά ή δεξιά, αντίστοιχα, με διάνυσμα θέσης $\mathbf{A}_l$ ($\mathbf{A}_r$) ως προς την αρχή των αξόνων και με διάνυσμα $-\mathbf{d}_l$ ($\mathbf{d}_r$) ως προς το κέντρο του επιπέδου. Για αυτό το σημείο η εξίσωση του κύματος στα αριστερά του επιπέδου μπορεί να γραφεί $\sum_{\mathbf{g}p} E^s_{\mathbf{g}p} e^{i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{A}_l)}\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})$, ενώ στα δεξιά $\sum_{\mathbf{g}p} E^s_{\mathbf{g}p} e^{i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{A}_r)}\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})$.

Για να συνεχίσουμε πρέπει να ορίσουμε τους πίνακες $\mathbf{Q}$. Αυτοί, συνδέονται άμεσα με τους αντίστοιχους πίνακες $\mathbf{S}$ και συσχετίζουν το πλάτος του προσπίπτοντος κύματος, με τα πλάτη του διερχόμενου και του ανακλώμενου κύματος για επιθυμητά σημεία, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω. Ισχύει, λοιπόν

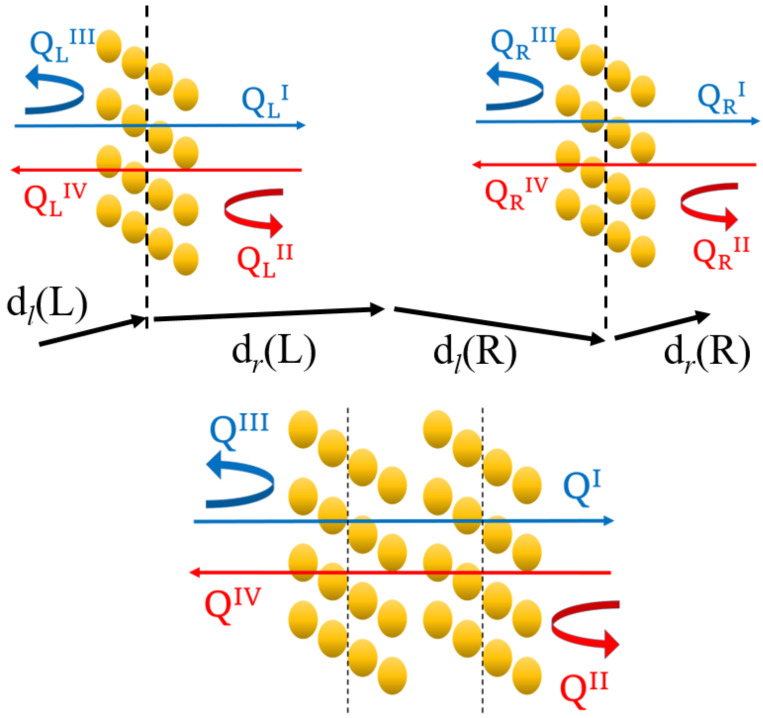
$$
\begin{aligned}
Q^{\mathbf{I}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} &= S^{++}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} e^{i(\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{d}_r+\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{d}_l)} \\
Q^{\mathbf{II}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} &= S^{+-}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} e^{i(\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{d}_r-\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{d}_r)} \\
Q^{\mathbf{III}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} &= S^{-+}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} e^{-i(\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{d}_l-\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{d}_l)} \\
Q^{\mathbf{IV}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} &= S^{--}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'} e^{-i(\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{d}_l+\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}'}\cdot\mathbf{d}_r)} \ .
\end{aligned}
\tag{1.90}
$$

Ο ορισμός των πινάκων $\mathbf{Q}$ έγινε διότι με τη βοήθεια αυτών είναι δυνατός ο υπολογισμός της οπτικής απόκρισης πολυστρωματικής δομής. Έχουν παρόμοια φυσική σημασία με τους πίνακες $\mathbf{S}$, με τη διαφορά ότι τα αναπτύγματα των επιπέδων κυμάτων τώρα έχουν διαφορετικά σημεία ανάπτυξης, σε αντίθεση με τους $\mathbf{S}$ που γίνονται ως προς το ίδιο σημείο. Στη συνέχεια για λόγους συντομίας οι πίνακες $\mathbf{Q}$ θα γράφονται ως εξής $\mathbf{Q}^{\mathbf{I}}$, $\mathbf{Q}^{\mathbf{II}}$, $\mathbf{Q}^{\mathbf{III}}$ και $\mathbf{Q}^{\mathbf{IV}}$. Δηλαδή θα παραλείπεται η αλληλουχία στη δεικτοδότηση των στοιχείων των πινάκων $\mathbf{g}_1 1$, $\mathbf{g}_1 2$, $\mathbf{g}_2 1$, $\mathbf{g}_2 2$, ... κ.ο.κ. Θεωρητικά, ο δείκτης $\mathbf{g}$ εκτείνεται μέχρι το άπειρο, πρακτικά, όμως κρατάμε μέχρι ένα μέγιστο $\mathbf{g}_{\max}$, για το οποίο επιτυγχάνεται σύγκλιση των αποτελεσμάτων και, έτσι, τελικά, η διάσταση των πινάκων $\mathbf{Q}$ γίνεται $2\mathbf{g}_{\max} \times 2\mathbf{g}_{\max}$.

Έστω, λοιπόν, ότι έχουμε δύο διαφορετικά επίπεδα που βρίσκονται σε διαφορετικά περιβάλλοντα μέσα. Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να θεωρήσουμε ότι διαχωρίζονται από μια επίπεδη επιφάνεια που προκαλεί επιπλέον σκεδάσεις. Μπορούμε να υπολογίσουμε τους πίνακες $\mathbf{Q}_{\mathrm{L}}$ και $\mathbf{Q}_{\mathbf{R}}$ για το αριστερό και το δεξί επίπεδο, αντίστοιχα, όπως φαίνεται στο Σχ.1.4, επιλέγοντας τα $\mathbf{d}_l$ και $\mathbf{d}_r$, έτσι ώστε το σημείο ως προς το οποίο αναπτύσσονται τα κύματα μεταξύ των δύο διαδοχικών στρωμάτων να είναι κοινό, δηλαδή $\mathbf{A}_r(\mathrm{L}) = \mathbf{A}_l(\mathbf{R})$. Για να υπολογιστούν οι συνολικοί πίνακες σκέδασης - ανάκλασης όλης της πολυστρωματικής δομής, πρέπει να ληφθούν υπόψη οι πολλαπλές σκεδάσεις μεταξύ των δύο στρωμάτων. Είναι εύκολο να δείξει κάποιος αφού αθροίσει σε άπειρες σειρές ότι

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Q}^{\mathbf{I}} &= \mathbf{Q}^{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}} \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}} \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}}\right]^{-1} \mathbf{Q}^{\mathbf{I}}_{\mathrm{L}} \ , \\
\mathbf{Q}^{\mathbf{II}} &= \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathbf{R}} + \mathbf{Q}^{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}} \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}} \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}} \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}}\right]^{-1} \mathbf{Q}^{\mathbf{IV}}_{\mathbf{R}} \ , \\
\mathbf{Q}^{\mathbf{III}} &= \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathrm{L}} + \mathbf{Q}^{\mathbf{IV}}_{\mathrm{L}} \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}} \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}} \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}}\right]^{-1} \mathbf{Q}^{\mathbf{I}}_{\mathrm{L}} \ , \\
\mathbf{Q}^{\mathbf{IV}} &= \mathbf{Q}^{\mathbf{IV}}_{\mathrm{L}} \left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}} \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}}\right]^{-1} \mathbf{Q}^{\mathbf{IV}}_{\mathbf{R}} \ .
\end{aligned}
\tag{1.91}
$$

Πρέπει να τονιστεί ότι όλοι οι $\mathbf{Q}$ αναφέρονται στα ίδια ω και $\mathbf{k}_{\parallel}$. Μια σχηματική αναπαράσταση της φυσικής σημασίας των πινάκων $\mathbf{Q}$ φαίνεται στο Σχ.1.4. Αν κάποιος θέλει να υπολογίσει την οπτική απόκριση από τρία στρώματα, τότε βρίσκει πρώτα τους πίνακες $\mathbf{Q}$ των πρώτων δύο στρωμάτων και στη συνέχεια συνδυάζει αυτούς, με του τρίτου. Προφανώς αυτό μπορεί με παρόμοια λογική να γίνει για οποιοδήποτε πεπερασμένο αριθμό από επίπεδα και να υπολογιστούν οι συνολικοί πίνακες $\mathbf{Q}$ για οποιαδήποτε πολυστρωματική δομή. Ο



Σχήμα 1.4: Σχηματική αναπαράσταση της φυσικής σημασίας των πινάκων Q για δύο διαδοχικά πλέγματα σφαιρών.

υπολογισμός των πινάκων $\mathbf{Q}$ για μια πολυστρωματική δομή είναι πολύ σημαντικός για τη μελέτη της οπτικής απόκρισής του, διότι μεταξύ άλλων δίνει τη δυνατότητα για τον άμεσο υπολογισμό των συντελεστών διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης όλης της δομής.

Θεωρούμε ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει από τα αριστερά της δομής με εξίσωση

$$\mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) = [E_{\rm in}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\, e^{[i\mathbf{K}^{+}_{(\rm L)\mathbf{g}'}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{A}_{\rm L})]}\hat{\mathbf{e}}_{p'}(\mathbf{K}^{+}_{(\rm L)\mathbf{g}'}) \tag{1.92}$$

Το ανακλώμενο στα αριστερά θα είναι

$$\mathbf{E}_{\mathrm{rf}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}p}\, e^{[i\mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{A}_{\mathrm{L}})]}\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}}), \tag{1.93}$$

ενώ το διερχόμενο προς τα δεξιά

$$\mathbf{E}_{\mathrm{tr}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}p}\, e^{[i\mathbf{K}^{+}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{A}_{\mathbf{R}})]}\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^{+}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}}). \tag{1.94}$$

Οι δείκτες (L) και (R) αναφέρονται στα ημιάπειρα μέσα αριστερά και δεξιά της δομής, αντίστοιχα. Επίσης το $\mathbf{A}_{\mathrm{L}}$ ($\mathbf{A}_{\mathbf{R}}$) αναφέρεται σε κατάλληλο σημείο αναφοράς στα αριστερά (δεξιά) της δομής. Ισχύει

$$[E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}p} = Q^{\mathbf{I}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}\, [E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'} \tag{1.95}$$

$$[E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}p} = Q^{\mathbf{III}}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}\, [E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\ . \tag{1.96}$$

Ο πίνακας $\mathbf{Q}$ περιγράφει όλη την πολυστρωματική δομή και συμπεριλαμβάνει και τις εξωτερικές της επιφάνειες, αν υπάρχουν.

Πλέον, είναι εύκολο να υπολογιστεί ο συντελεστής διέλευσης $\mathcal{T}$ και ανάκλασης $\mathcal{R}$. Ο συντελεστής διέλευσης (ανάκλασης) ορίζεται ως το πηλίκο της ροής του διερχόμενου (ανακλώμενου) κύματος δια εκείνη του προσπίπτοντος. Έτσι, λοιπόν, πρέπει να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα του διανύσματος Poynting σε όλο το επίπεδο xy, αν και αρκεί απλά να γίνει στην επιφάνεια της μοναδιαίας κυψελίδας, στην κατάλληλη φορά της δομής - ανάλογα αν κάποιος θέλει να υπολογίσει τη διέλευση ή την ανάκλαση. Παίρνοντας την μέση τιμή για μια περίοδο $T = 2\pi/\omega$, προκύπτει

$$\mathcal{T} = \frac{\sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}p} \left([E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}p}\right)^{*} K^{+}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}z}}{[E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'} \left([E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'z}} \tag{1.97}$$

$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{\mathbf{g}p} [E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}p} \left([E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}p}\right)^{*} K^{+}_{(\mathbf{R})\mathbf{g}z}}{[E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'} \left([E_{\mathrm{in}}]^{+}_{\mathbf{g}'p'}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'z}}\,, \tag{1.98}$$

όπου το σύμβολο $*$ συμβολίζει το μιγαδικό συζυγή. Τέλος υπάρχουν κάποιοι περιορισμοί που επιβάλλονται στον πίνακα **S**. Αρχικά πρέπει να είναι μοναδιακός, λόγω αρχής διατήρησης της ροής, ενώ οι ιδιοτιμές του πρέπει να είναι αναλυτικές συναρτήσεις στο άνω ημιεπίπεδο των συχνοτήτων λόγω της αρχής της αιτιότητας.

Είναι πολύ σημαντικό να τονιστεί ότι στο κάτω ημιεπίπεδο είναι δυνατόν να υπάρχουν πόλοι στα σημεία $\omega_i - i\gamma_i$, $\gamma_i \geq 0$, [49] όπου ω_i είναι η ιδιοσυχνότητα και γ_i ο αντίστροφος χρόνος ζωής της αντίστοιχης κατάστασης. Αν $\gamma_i \ll \omega_i$, αυτοί αντιστοιχούν σε καταστάσεις συντονισμού και έχουν μεγάλο φυσικό ενδιαφέρον. Για να υπολογιστούν αυτές, πρέπει να βρεθεί το πεδίο χωρίς την ύπαρξη εξωτερικής διέγερσης. Επιβάλλοντας, λοιπόν, το μηδενισμό του εισερχόμενου φωτός έχουμε

$$[E]^+_{\mathbf{g}p} = Q^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}} [E]^-_{\mathbf{g}'p'} \,, \tag{1.99}$$

και

$$[E]^-_{\mathbf{g}p} = Q^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}_{\mathbf{g}p;\mathbf{g}'p'}} [E]^+_{\mathbf{g}'p'} \,. \tag{1.100}$$

Αν γράψουμε τις παραπάνω σε μορφή πινάκων

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}} \\ \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\mathbf{E}]^+ \\ [\mathbf{E}]^- \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \tag{1.101}$$

Για να έχει μη τετριμμένες λύσεις πρέπει

$$\det(\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathbf{II}}_{\mathrm{L}} \mathbf{Q}^{\mathbf{III}}_{\mathbf{R}}) = \mathbf{0}. \tag{1.102}$$

Λύνοντας την Εξ. (1.102) μπορεί κάποιος να υπολογίσει τις ιδιοσυχνοτήτες και μέσω της Σχ.1.101 μπορούν να βρεθούν τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα του πεδίου.

Βιβλιογραφία

[1] Grimberg R. Electromagnetic metamaterials. Mater Sci Eng, B. 178(19):1285–95 (2013).

[2] Zheludev N. I., Kivshar Y. S. From metamaterials to metadevices. Nat Mater.11(11):917–24 (2012)

[3] Smith DR, Pendry JB, Wiltshire MC Metamaterials and negative refractive index. Science. 305(5685):788–92 (2004).

[4] Valentine J, Zhang S, Zentgraf T, Ulin-Avila E, Genov DA, Bartal G, et al. Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index. Nature. 455(7211):376–9 (2008).

[5] Ziolkowski RW Propagation in and scattering from a matched metamaterial having a zero index of refraction. Phys Rev E–Stat Nonlin Soft Matter Phys. 70(4):046608 (2004).

[6] Pimenov A, Loidl A. Experimental demonstration of artificial dielectrics with a high index of refraction. Phys Rev B. 74(19):193108 (2006).

[7] Shen JT, Catrysse PB, Fan S. Mechanism for designing metallic metamaterials with a high index of refraction. Phys Rev Lett. 94(19):197401 (2005).

[8] Khorasaninejad M, Chen WT, Devlin RC, Oh J, Zhu AY, Capasso F. Metalenses at visible wavelengths: diffraction-limited focusing and subwavelength resolution imaging. Science. 352(6290):1190–4 (2016).

[9] Maci S, Minatti G, Casaletti M, Bosiljevac M. Metasurfing: addressing waves on impenetrable metasurfaces. IEEE Antenn Wireless Propag Lett. 10:1499–502 (2011).

[10] Meinzer N, Barnes WL, Hooper IR. Plasmonic meta-atoms and metasurfaces. Nat Photon. 8(12):889–98 (2014).

[11] Juliano Martins, R., Marinov, E., Youssef, M.A.B. et al. Metasurface-enhanced light detection and ranging technology. Nat Commun 13, 5724 (2022). https://doi.org/10.1038/s41467-022-33450-2

[12] Bomzon, Z. E., Kleiner, V. Hasman, E. Pancharatnam–Berry phase in space-variant polarization-state manipulations with subwavelength gratings. Opt. Lett. **26**, 1424–1426 (2001).

[13] Yu, N. F. et al. Light propagation with phase discontinuities: generalized laws of reflection and refraction. Science **334**, 333–337 (2011).

[14] Hsiao, H. H., Chu, C. H., Tsai, D. P. Fundamentals and applications of metasurfaces. Small Methods 1, 1600064 (2017).

[15] Kuznetsov, A. I., Miroshnichenko, A. E., Brongersma, M. L., Kivshar, Y. S., Luk'yanchuk, B. Optically resonant dielectric nanostructures. Science 354, 2472 (2016).

[16] Decker, M. et al. High-efficiency dielectric huygens' surfaces. Adv. Opt. Mater. 3, 813–820 (2015).

[17] W. Kohn and N. Rostoker, Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium, Phys. Rev. 94, 1111 (1954).

[18] J. Korringa, On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal, Physica $13, 392(1947)$.

[19] S. John, "Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices," Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987).

[20] E. Yablonovitch, "Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics," Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).

[21] V. P. Bykov, "Spontaneous emission in a periodic structure," Sov. Phys. JETP 35,269 (1972).

[22] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Princeton University Press, Princeton, N.J., 1995).

[23] N. Stefanou and A. Modinos, "Scattering of light by a two-dimensional array of spherical particles on a substrate," J. Phys.: Condens. Matter 3, 8135 (1991).

[24] N. Stefanou, V. Karathanos, and A. Modinos, "Scattering of electromagnetic waves by periodic structures," J. Phys.: Condens. Matter 4, 7389 (1992).

[25] N. Stefanou, V. Yannopapas, and A Modinos, Comput. Phys. Commun. **113**, 49-77 (1998).

[26] N. Stefanou, V. Yannopapas, and A. Modinos, Comput. Phys. Commun. **132**, 189-196 (2000).

[27] A. Blanco, E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibisate, S. John, S. W. Leonard, C. Lopez, F. Meseguer, H. Miguez, J. P. Mondia, G. A. Ozin, O. Toader, and H. M. van Driel, "Large-scale synthesis of a silicon photonic crystal with a complete three-dimensional bandgap near 1.5 micrometres," Nature 405, 437 (2000).

[28] G. Gantzounis and N. Stefanou, "Layer-multiple-scattering method for photonic crystals of nonspherical particles," Phys. Rev. B 73, 035115 (2006).

[29] G. Gantzounis, Optical Properties of Complex Photonic Systems, PhD Thesis, (Athens, 2008).

[30] G. Gantzounis, Optical Properties of Complex Photonic Systems, PhD Thesis, (Athens, 2008).

[31] C. Tserkezis, G. Gantzounis, N. Stefanou, "Collective plasmonic modes in ordered assemblies of metallic nanoshells," J. Phys. Condens. Mat. 20, 075232 (2008).

[32] G. Gantzounis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, "Optical properties of periodic structures of metallic nanodisks," Phys. Rev. B 77(3), 035101 (2008).

[33] V. Yannopapas, "Layer-multiple-scattering method for photonic structures of general scatterers based on a discrete-dipole approximation/T-matrix point-matching method," J. Opt. Soc. Am. B 31, 631-636 (2014).

[34] C. Tserkezis, N. Papanikolaou, E. Almpanis, and N. Stefanou, "Tailoring plasmons with metallic nanorod arrays," Phys. Rev. B 80(12), 125124 (2009).

[35] C. Tserkezis, N. Papanikolaou, G. Gantzounis, and N. Stefanou, "Understanding artificial optical magnetism of periodic metal-dielectric-metal layered structures," Phys. Rev. B 78(16), 165114 (2008).

[36] A. Christofi and N. Stefanou, "Photonic structures of metal-coated chiral spheres," J. Opt. Soc. Am. B 29(6), 1165 (2012).

[37] A. Christofi, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, "Periodic structures of magnetic garnet particles for strong Faraday rotation enhancement," Phys. Rev. B 89(21), 214410 (2014).

[38] E. Almpanis, Photonic structures for the control of light at the nanoscale, PhD Thesis, (Athens, 2014).

[39] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1975).

[40] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, International edition, 1995).

[41] G. Mie, "Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen," Ann. Phys. **25**, 377 (1908).

[42] P. Debye, "Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material," Ann. Phys. **30**, 57 (1909).

[43] Kerker, M. The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation: Physical Chemistry: A Series of Monographs; Academic Press: Cambridge, MA, USA, 2013; Volume 16.

[44] Bohren, C. F. Huffman, D. R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles, Wiley: New York, 1998.

[45] Kerker, M.; Wang, D.S.; Giles, C.L. Electromagnetic scattering by magnetic spheres. J. Opt. Soc. Am. 1983, **73**, 765–767.

[46] Wei Liu and Yuri S. Kivshar, "Generalized Kerker effects in nanophotonics and meta-optics [Invited]," Opt. Express 26, 13085-13105 (2018)

[47] G. Gantzounis and N. Stefanou, Phys. Rev. B **73**, 035115 (2006).

[48] J .M. MacLaren, S. Crampin, D. D. Vvedensky, R. C. Albers, and J. B. Pendry, Comput. Phys. Commun. **60**, 365-389 (1990).

[49] E. Almpanis, Optomagnonic Structures: Novel Architectures for Simultaneous Control of Light and Spin Waves, 2022.

Κεφάλαιο 2

Μελέτη μεταεπιφανειών πυριτίου

2.1 Εισαγωγή

Έχοντας, λοιπόν, επεκτείνει τη στρωματική μέθοδο πολλαπλής σκέδασης, ο στόχος μας ήταν να μελετήσουμε επιφάνειες, οι οποίες μας δίνουν τη δυνατότητα να ελέγχουμε κατά βούληση το κυματομέτωπο. Ένας τρόπος για να γίνει αυτό είναι χρησιμοποιώντας τους συντονισμούς Mie διηλεκτρικών, κυρίως, σωματιδίων [1, 2, 3, 4]. Συγκεκριμένα, όταν έχουμε αλληλεπικάλυψη συντονισμών διαφορετικού τύπου - μαγνητικού - ηλεκτρικού ή/και διαφορετικής τάξης είναι δυνατό να ελέγξουμε και να κατευθύνουμε το ΗΜ κύμα. Όταν πρόκειται για μεμονωμένους σκεδαστές η αλληλεπίδραση μεταξύ των συντονισμών μπορεί να περιγραφεί με το γενικευμένο φαινόμενο Kerker.

Πριν το περιγράψουμε, αξίζει να αναφερθούμε στο (μη γενικευμένο) φαινόμενο Kerker. Ήδη από το 1983 [5] ο Kerker μελέτησε τη σκέδαση από μικρή μαγνητική σφαίρα με μαγνητική διαπερατότητα $\mu_s \neq 1$. Ένα από τα σημαντικότερα ευρήματα του ήταν ότι στην περίπτωση που η διηλεκτρική σταθερά και η μαγνητική διαπερατότητα της σφαίρας ήταν ίσες, $\mu_s = \epsilon_s$, η οπισθοσκέδαση μηδενιζόταν και το σκεδαζόμενο ΗΜ κύμα είχε κατεύθυνση προς τα εμπρός. Αν ο σκεδαστής έχει στην ίδια περιοχή συχνοτήτων δύο επικαλυπτόμενους συντονισμούς ηλεκτρικού και μαγνητικού τύπου, ίδιας τάξης και ίδιας έντασης, σε φάση, τότε η οπισθοσκέδαση ελαχιστοποιείται. Αυτό, μπορεί να εξηγηθεί εύκολα παρατηρώντας τη σχέση (1.51), αφού όταν $\mu_s = \epsilon_s$, λαμβάνοντας υπόψη την (1.41), προκύπτει ότι

$$T_{E\ell} = T_{H\ell}, \tag{2.1}$$

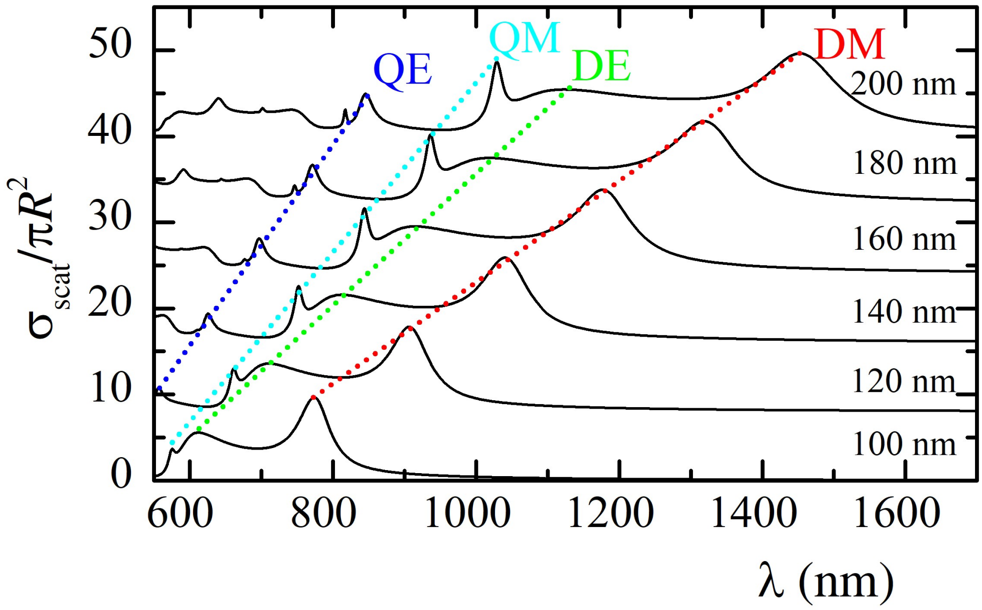
η οποία ουσιαστικά είναι η πρώτη συνθήκη Kerker, που αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο (1.52).

Δυστυχώς, η μελέτη του Kerker δεν ήταν δυνατόν να αξιοποιηθεί, αφού είναι ελάχιστα τα υλικά που από τη φύση τους είναι μαγνητικά, ειδικά στις υψηλές συχνότητες και στο ορατό. Όταν, όμως, εμφανίστηκαν τα υλικά με υψηλό δείκτη διάθλασης και η ιδέα του "τεχνητού" μαγνητισμού μέσω οπτικής διέγερσης, η αρχική θεωρία προσέλκυσε ξανά το ενδιαφέρον, με αποτέλεσμα να γίνει μια σημαντική επέκταση αυτής. Με τη γενικευμένη θεωρία Kerker [5, 6] περιγράφεται η σκέδαση όχι μόνο από σφαιρικά σωματίδια, αλλά από διάφορα σχήματα, ακόμα και από ομάδες σωματιδίων και, μάλιστα, σύμφωνα με τη γενικευμένη θεωρία, είναι δυνατόν κάποιος να οδηγήσει το κυματομέτωπο προς οποιαδήποτε κατεύθυνση. Ακόμα, κατευθυντική σκέδαση μπορεί να επιτευχθεί με την αλληλεπίδραση οποιασδήποτε τάξης συντονισμών, όχι μόνο των διπολικών. Συμπερασματικά, λοιπόν, για να ικανοποιηθούν οι συνθήκες Kerker απαιτείται η διέγερση δύο (ή περισσότερων) κατάλληλων συντονισμών και η αλληλεπικάλυψη τους. Έτσι μπορεί να έχουμε ενισχυτική ή αποσβεστική συμβολή και κατευθυντική σκέδαση [7, 8, 9].

Σε πλέγματα που χρησιμοποιούνται τέτοιοι σκεδαστές, η πολλαπλή σκέδαση μπορεί να αποδειχτεί πολύ σημαντική και πολλές φορές μπορεί, και πάλι, να περιγραφεί μέσω της αλληλεπίδρασης μεταξύ των συντονισμών Mie [10]. Σε περιοδικά πλέγματα, το πλέγμα προσδίδει έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας για τον έλεγχο των ιδιοτήτων της διέλευσης και της ανάκλασης, αφού είναι εφικτό να μετακινηθούν οι θέσεις των συντονισμών λόγω της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης. Επιπλέον, το φαινόμενο της περίθλασης, η οποία προκύπτει από την περιοδικότητα, μπορεί να συνδυαστεί με το σχήμα των κοντινών πεδίων των υβριδικών πολυπολικών συντονισμών Mie και να έχει ως αποτέλεσμα της ισχυρή κατευθυντικότητα του φωτός προς διαφορετικές κατευθύνσεις κατ΄ επιλογή.

2.2 Οι συντονισμοί Mie σφαιρών Si

Αρχικά, υπολογίστηκε η ενεργός διατομή σκέδασης μεμονωμένων σφαιρών πυριτίου σε αέρα, με ακτίνα R που παίρνει τιμές μεταξύ 100 και 200 nm, χρησιμοποιώντας τις οπτικές σταθερές μέσω προσαρμογής σε πειραματικά δεδομένα για το κρυσταλλικό Si [11]. Αυτή φαίνεται στο Σχ. 2.1. Για τις σφαίρες, η ενεργός διατομή σκέδασης αποτελείται από ηλεκτρική και μαγνητική συνεισφορά, $\sigma_{\mathrm{sc}} = 1/q^2 \sum_\ell (2\ell+1) \left(|T_{E\ell}|^2 + |T_{H\ell}|^2\right)$. Οι συντονισμοί μετακινούνται σε υψηλότερα μήκη κύματος όσο η ακτίνα αυξάνεται και η εξέλιξη αυτής της μετατόπισης έχει σημειωθεί με διακεκομμένες γραμμές στο Σχ. 2.1.



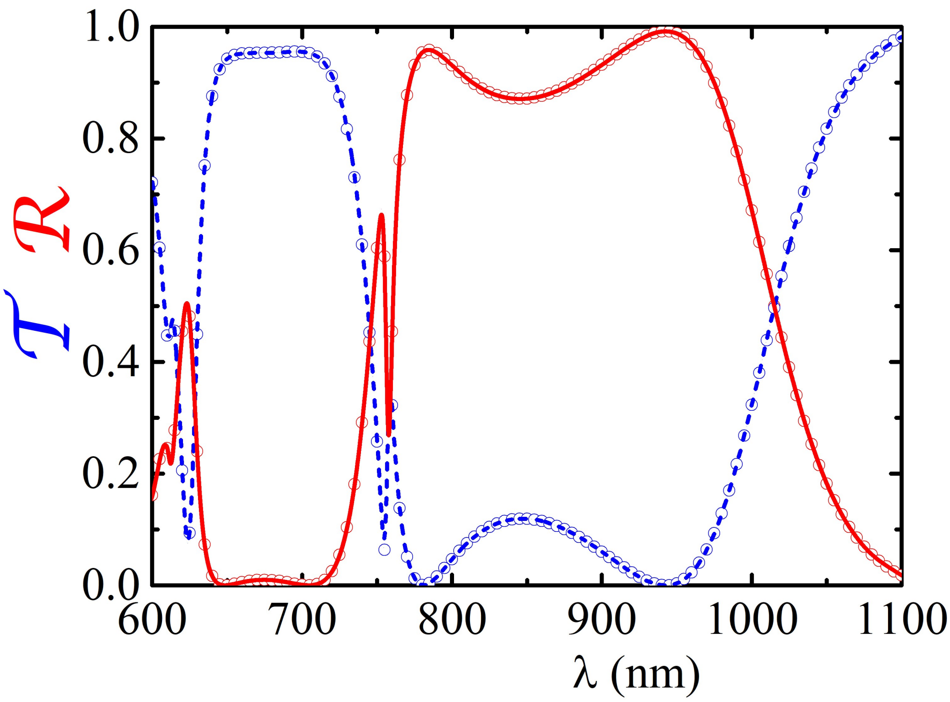
Σχήμα 2.1: Η ενεργός διατομή σκέδασης μεμονωμένων σφαιρών Si με ακτίνες (από κάτω προς τα πάνω) R = 100, 120, 140, 160, 180 και 200 nm, στον αέρα (οι καμπύλες είναι μετατοπισμένες). Έχουν χρησιμοποιηθεί οι διακεκομμένες χρωματιστές γραμμές ώστε να φαίνεται η εξέλιξη της μετακίνησης της καμπύλης των συντονισμών σε σχέση με την αλλαγή της ακτίνας. Με DM, DE συμβολίζονται ο διπολικός συντονισμός μαγνητικού τύπου και ο ηλεκτρικού τύπου, αντίστοιχα, και με QM, QE ο τετραπολικός μαγνητικού τύπου και ηλεκτρικού τύπου, αντίστοιχα.

Για να πετύχει κάποιος ισχυρή κατευθυντική σκέδαση πρέπει να επιλέξει πλέγματα που αποτελούνται από σφαίρες στις οποίες συντονισμοί διαφορετικών συμμετριών αλληλεπικαλύπτονται. Για παράδειγμα, σφαίρες με ακτίνες $R = 180$ nm έχουν τον ηλεκτρικό διπολικό συντονισμό τους (Electric Dipole - DE) λίγο πάνω από $\lambda = 1000$ nm, κοντά σε μήκη κύματος στα οποία βρίσκεται ο μαγνητικός διπολικός συντονισμός σφαιρών με ακτίνα $R = 140$ nm. Υπάρχει ακόμα μια ενδιαφέρουσα περιοχή του φάσματος. Λίγο κάτω από το $\lambda = 800$ nm, εμφανίζονται ταυτόχρονα ο τετραπολικός ηλεκτρικός συντονισμός (Electric Quadrapole - QE) μαζί με τον τετραπολικό μαγνητικό (Magnetic Quadrapole - QM). Στη συνέχεια, θα εκμεταλλευτούμε μερικούς από τους παραπάνω συνδυασμούς και θα κατασκευάσουμε επίπεδες γεωμετρίες από περιοδικά πλέγματα με σφαιρικούς σκεδαστές, τα οποία σκεδάζουν με ισχυρή κατευθυντικότητα, μέσω περίθλασης, φως το οποίο προσπίπτει κάθετα στο επίπεδο των σκεδαστών.

Οι ενεργειακές απώλειες, οι οποίες γίνονται πιο έντονες για μικρότερα μήκη κύματος για το πυρίτιο, επηρεάζουν πολύ λίγο τους διπολικούς συντονισμούς, αλλά εξασθενούν τη σκέδαση των τετραπολικών και των υψηλότερης τάξης συντονισμών. Σε αυτό το κεφάλαιο, λοιπόν, θα εστιάσουμε στην αλληλεπίδραση μεταξύ των πολυπολικών συντονισμών Mie των σφαιρών και στο συσχετισμό αυτής με τα διαφορετικά "κανάλια" περίθλασης.

2.3 Πλέγμα με σφαίρες πυριτίου σε πολύ κοντινή απόσταση

Όταν το πλέγμα έχει περιοδικότητα μικρότερη από το μήκος κύματος, επιτρέπονται μόνο δέσμες οι οποίες έχουν ίδια διεύθυνση με την προσπίπτουσα (μηδενικής τάξης περίθλαση). Γι΄ αυτό το λόγο, η οπτική απόκριση μπορεί να συσχετιστεί με τους μιγαδικούς συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης ή με την εμπέδηση και τις οπτικές σταθερές ενεργού μέσου [12]. Αρχικά, θεωρούμε ένα τετραγωνικό πλέγμα με πλεγματική σταθερά $a_{x,y} = 400$ nm, αποτελούμενο από σφαίρες πυριτίου που έχουν την ίδια ακτίνα R =140 nm και βρίσκονται μέσα σε αέρα. Το φάσμα της διέλευσης και της απορρόφησης, υπό κάθετη πρόσπτωση, απεικονίζονται στο Σχ. 2.2. Σε αυτό, διακρίνονται δύο συντονισμοί, ο πρώτος εκ των οποίων βρίσκεται κοντά στο $\lambda = 940$ nm και είναι διπολικού μαγνητικού τύπου, ενώ ο δεύτερος κοντά στα $\lambda = 790$ nm και είναι διπολικού ηλεκτρικού τύπου. Και οι δύο εμφανίζονται ως



Σχήμα 2.2: Η οπτική διέλευση $\mathcal{T}$ (μπλε διακεκομμένη γραμμή), η ανάκλαση $\mathcal{R}$ (κόκκινη γραμμή) ενός τετραγωνικού πλέγματος με πλεγματική σταθερά $a_{x,y} = 400$ nm, που αποτελείται από σφαίρες πυριτίου με ακτίνες R =140 nm, στον αέρα, για κάθετη πρόσπτωση. Οι γραμμές αντιστοιχούν στα αποτελέσματα από τους υπολογισμούς με τη μέθοδο LMS, ενώ με ανοικτούς κύκλους από το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics.

κορυφές στην ανάκλαση και, συγκρίνοντας με το Σχ. 2.1, παρατηρούμε ότι είναι λίγο μετατοπισμένες σε σχέση με τη θέση που θα είχαν σε μεμονωμένες σφαίρες, το οποίο συμβαίνει λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Στα μήκη κύματος μεταξύ των δύο αυτών συντονισμών, η ανάκλαση παραμένει σε υψηλά επίπεδα, ενώ η μείωση της πλεγματικής σταθεράς οδηγεί στη δημιουργία ενός τέλειου ανακλαστήρα ευρέος φάσματος, με ανάκλαση πολύ κοντά στη μονάδα.

Αξίζει να αναφερθεί ότι το φάσμα, το οποίο υπολογίστηκε με τη μέθοδο LMS (γραμμή στο Σχ. 2.2) έρχεται σε απόλυτη συμφωνία με το αντίστοιχο, που προκύπτει με τη χρήση του προγράμματος COMSOL, το οποίο στηρίζεται στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, η οποία όμως είναι πολύ πιο απαιτητική υπολογιστικά και χρονικά (ανοικτοί κύκλοι στο Σχ. 2.2).

Η ισχυρή ανάκλαση μπορεί να αποδοθεί στη σκέδαση στις περιοχές του φάσματος κοντά στους συντονισμούς Mie [13], λόγω της καταστροφικής συμβολής προς τα εμπρός που έχει ως συνέπεια το μηδενισμό της διέλευσης. Πρέπει να τονιστεί ότι η συγκεκριμένη γεωμετρία παρουσιάζει ένα αρκετά μεγάλο εύρος στο οποίο η διέλευση ελαχιστοποιείται, από τα 780 έως τα 950 nm, και ότι στις συγκεκριμένες συχνότητες δεν εμφανίζεται το φαινόμενο της περίθλασης, συνεπώς μόνο το κανάλι μηδενικής τάξης είναι επιτρεπτό, κάτι το οποίο μας δίνει τη δυνατότητα για την περιγραφή του φαινομένου να χρησιμοποιήσουμε τη θεωρία του ενεργού μέσου (effective medium theory) [14].

Μπορεί, κάποιος, να πετύχει ισχυρή ανισοτροπική σκέδαση χρησιμοποιώντας και άλλους συντονισμούς Mie, εκτός από τους διπολικούς. Για παράδειγμα, ενδιαφέροντα φαινόμενα αναμένουμε και από την αλληλεπίδραση των τετραπολικών συντονισμών. Όμως, σε περιοδικές δομές με πλεγματική σταθερά μικρότερη από το μήκος κύματος στις οποίες δεν εμφανίζονται περιθλώμενες δέσμες, οι τετραπολικοί συντονισμοί χαρακτηρίζονται από πολύ ισχυρή απορρόφηση [15]. Παρόλα αυτά, η συμπεριφορά αυτή διαφοροποιείται όταν τα κανάλια περίθλασης ανοίγουν και έτσι σε αυτές τις περιπτώσεις μπορεί να επιτευχθεί ισχυρή ανισοτροπική σκέδαση λόγω υψηλότερης τάξης συντονισμών.

2.4 Περίθλαση από ζεύγη σφαιρών Si

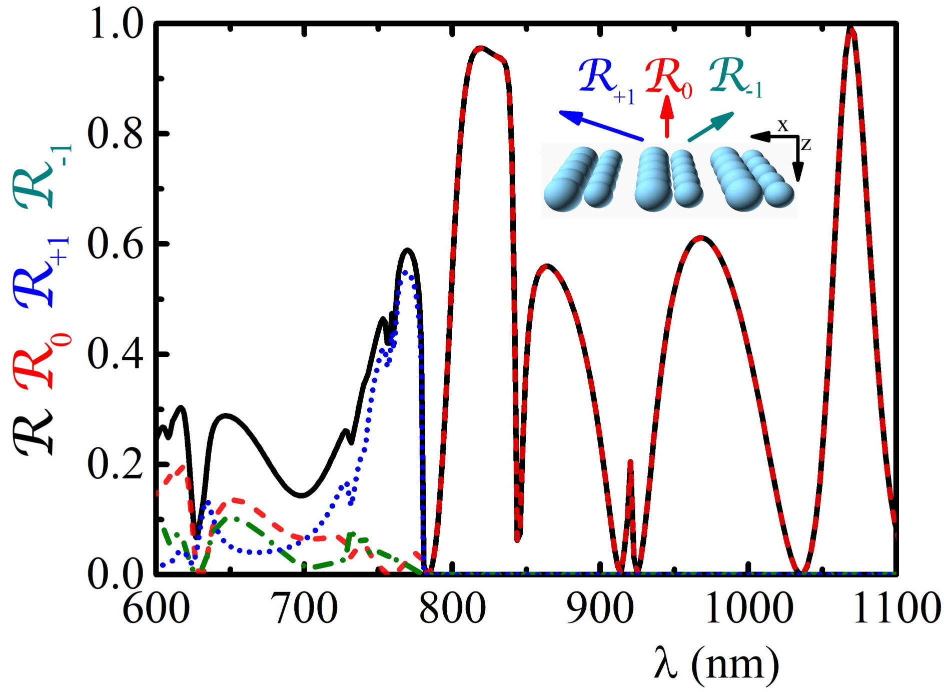
Μέχρι τώρα συζητήσαμε για περιπτώσεις πλεγμάτων με πλεγματικές σταθερές μικρότερες του μήκους κύματος και εστιάσαμε σε μια συγκεκριμένη περίπτωση, στην οποία οι διπολικοί συντονισμοί Mie είναι η αιτία δημιουργίας μιας πλατιάς ζώνης συχνοτήτων, στην οποία παρουσιάζεται ισχυρή ανάκλαση. Όμως, στις περιπτώσεις στις οποίες το μήκος κύματος είναι μικρότερο από τη μέγιστη συχνότητα περίθλασης, η οπτική ισχύς μοιράζεται και στα υπόλοιπα κανάλια περίθλασης, εκτός από εκείνο της μηδενικής τάξης.

Η γωνία περίθλασης για μια συγκεκριμένη τάξης δέσμης m_i κατά μήκος της διεύθυνσης της περιόδου $a_i (i = x, y)$ για μήκος κύματος λ δίνεται από τη σχέση

$$\phi_{m_i} = \arcsin(m_i \lambda / a_i n) \tag{2.2}$$

με n το δείκτη διάθλασης του περιβάλλοντος μέσου. Σε συμμετρικά πλέγματα, το φως μοιράζεται στις περιθλώμενες δέσμες $\pm m_i$, αλλά σε δομές με ασυμμετρία το φως είναι δυνατόν να περιθλάται μόνο προς σε μια συγκεκριμένη τάξη περίθλασης [16, 17, 18].

Έχουν προταθεί αρκετές ιδέες για ανακλαστικές μεταεπιφάνειες [19, 20] και, πρόσφατα, αναπτύχθηκαν κανόνες για το σχεδιασμό τέτοιων δομών [18]. Για να φτιαχτεί μεταεπιφάνεια που να ευνοεί τη διέλευση [21, 22, 23], μια ιδέα είναι να χρησιμοποιηθούν ασύμμετροι σκεδαστές στο πλέγμα, οι οποίοι να αποκλείουν την δέσμη μηδενικής τάξης και, ταυτόχρονα, να ευνοούν την αύξηση μιας συγκεκριμένης τάξης περίθλασης. Εμείς θα κατασκευάσουμε μια μεταεπιφάνεια η οποία αποτελείται από διμερή Si. Έχει δειχθεί ότι αυτά τα διμερή παρουσιάζουν πολύ ισχυρή κατευθυντική σκέδαση [24, 25], οπότε, αν τα χρησιμοποιήσουμε σε πλέγμα, αναμένουμε να εμφανιστούν ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά, λόγω περίθλασης.



Σχήμα 2.3: Ανάκλαση, υπό κάθετη πρόσπτωση, από ένα ορθογώνιο πλέγμα ($a_x = 790$ nm, $a_y = 400$ nm) αποτελούμενο από σφαίρες πυριτίου με ακτίνες $R_1 = 140$ nm και $R_2 = 175$ nm, έχοντας τα κέντρα τους στο ίδιο επίπεδο, ενώ η μεταξύ τους απόσταση είναι 15 nm κατά μήκος του άξονα x. Μαύρη γραμμή: Η συνολική ανάκλαση, $\mathcal{R}$. Διακεκομμένη κόκκινη γραμμή: Η ανάκλαση της μηδενικής τάξης περίθλασης, $\mathcal{R}_0$. Εστιγμένη μπλε γραμμή: Η ανάκλαση απο την $m_x = +1$ περιθλώμενη δέσμη, $\mathcal{R}_{+1}$. Εστιγμένη-διακεκομμένη πράσινη γραμμή: Η ανάκλαση της $m_x = -1$ περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{R}_{-1}$.

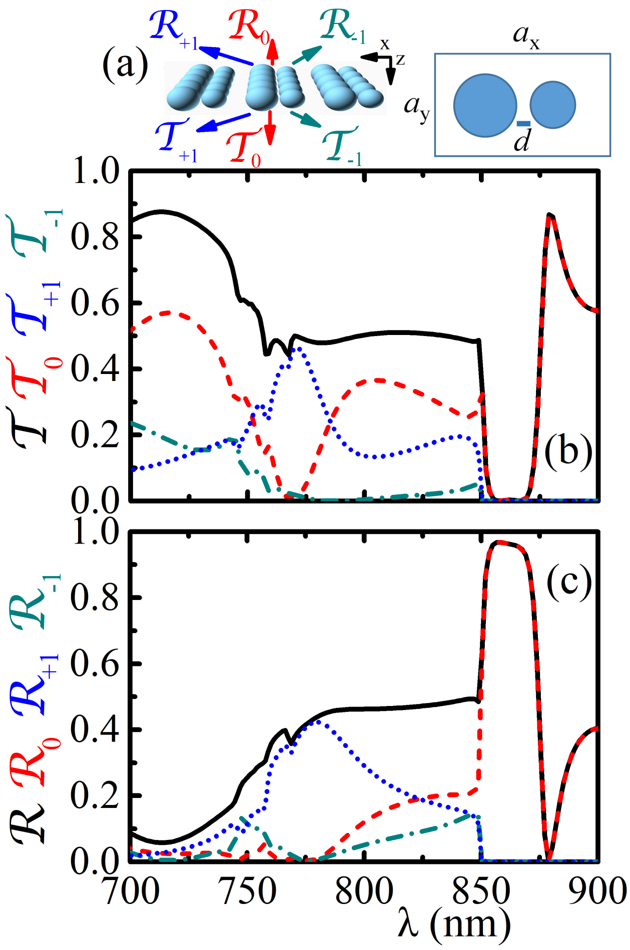
Στο Σχ. 2.3 φαίνεται το φάσμα ανάκλασης για φως που προσπίπτει κάθετα, με πόλωση κατά μήκος του μεγαλύτερου άξονα περιοδικότητας x σε ορθογώνιο πλέγμα με $a_x = 790$ nm και $a_y = 400$ nm, το οποίο αποτελείται από διμερή Si με ακτίνες $R_1 = 140$ nm και $R_2 = 175$ nm. Τα κέντρα των σφαιρών βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο και έχουν απόσταση ίση με 15 nm κατά μήκος της διεύθυνσης x. Όπως φαίνεται στο φάσμα στο Σχ. 2.3 παρουσιάζονται ενδιαφέροντα φαινόμενα πάνω από το όριο περίθλασης ($\lambda_{\rm diff} = 790$ nm). Για παράδειγμα, υπάρχει ακόμα η ζώνη ανάκλασης κοντά στα 800 nm, η οποία συζητήθηκε στο προηγούμενο εδάφιο (Σχ. 2.3), παρόλο που τώρα υπάρχουν δύο σφαίρες. Αυτή, διατηρείται λόγω της αποσβεστικής συμβολής που συμβαίνει από τους διπολικούς συντονισμούς των μικρών σφαιρών ($R_1 = 140$ nm), παρόλο που οι μεγαλύτερες σφαίρες ($R_2 = 175$ nm) έχουν και αυτές συνεισφορά, αφού εκεί παρουσιάζουν τετραπολικό συντονισμό (Σχ. 2.1).

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η περιοχή κάτω από το όριο περίθλασης. Στο Σχ. 2.3 βλέπουμε ότι, κάτω από το $\lambda_{\rm diff} = a_x = 790$ nm, το φως ακολουθεί διάφορα κανάλια περίθλασης ($m = 0, \pm 1$) τα οποία φαίνονται ξεχωριστά. Παρόλο που η συνολική ανάκλαση κοντά στο $\lambda = 770$ nm δεν ξεπερνά το 60%, η ενέργεια του ανακλώμενου φωτός σχεδόν ολόκληρη διοχετεύεται στο κανάλι περίθλασης πρώτης τάξης $m_x = +1$, ενώ η μηδενική ($m = 0$) και η $m_x = -1$ μειώνονται ισχυρά, κάτι το οποίο φαίνεται στα αντίστοιχα φάσματα στο Σχ. 2.3.

Αξίζει να αναφερθεί ότι, στη συγκεκριμένη περιοχή μηκών κύματος (λίγο κάτω από τα 790 nm), οι συντονισμοί QE και QM των σφαιρών αλληλεπικαλύπτονται, όπως φαίνεται από αντίστοιχο διάγραμμα για τις ενεργές διατομές σκέδασης των μεμονωμένων σφαιρών (Σχ. 2.1). Το γεγονός ότι οι δύο σκεδαστές έχουν διαφορετικό μέγεθος (χωρικά ασύμμετρο διμερές), σε συνδυασμό με τη σύζευξη του κοντινού πεδίου του διμερούς με το μακρινό πεδίο (περίθλασης) του πλέγματος, οδηγεί το φως με πολύ μεγάλη γωνία ανάκλασης. Συγκεκριμένα, κοντά στα $\lambda = 769$ nm, η ανάκλαση γίνεται μέγιστη περίπου 56% και το φως οδηγείται σχεδόν όλο σε μια πολύ υψηλή γωνία ανάκλασης $\phi_{\rm refl} = 77^{\rm o}$.

2.5 Διαχωριστής Δέσμης

Η γεωμετρία που μελετήθηκε στο προηγούμενο εδάφιο 2.4, είναι αποτελεσματική στο να στρίψει το ανακλώμενο φως, όμως ένα σημαντικό ποσό της ισχύος καταλήγει στη δι-



Σχήμα 2.4: Η οπτική απόκριση ενός ορθογώνιου πλέγματος (a_x = 850 nm και a_y = 400 nm) από σφαίρες Si με ακτίνες R_1 =140 nm και R_2 =180 nm, οι οποίες έχουν τα κέντρα τους στο ίδιο επίπεδο και βρίσκονται σε απόσταση d =15 nm κατά μήκος του άξονα x. Η γεωμετρία φαίνεται στο (a) μαζί με μια κάτοψη της μοναδιαίας κυψελίδας. (b) Η διέλευση για κάθετη πρόσπτωση x-πολωμένου φωτός. Μαύρη γραμμή: Η συνολική διέλευση, $\mathcal{T}$. Διακεκομμένη κόκκινη γραμμή: Διέλευση της μηδενικής τάξεως περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_0$. Διακεκομμένη μπλε γραμμή: Διέλευση στο $m_x = +1$ κανάλι περίθλασης, $\mathcal{T}_{+1}$. Διακεκομμένη-εστιγμένη πράσινη γραμμή: Η διέλευση της $m_x = -1$ περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_{-1}$. (c) Όμοια με το (b), αλλά για την ανάκλαση.

έλευση -μπροστινή κατεύθυνση. Όπως συζητήθηκε προηγουμένως, πολύ σημαντικό ρόλο παίζει η αλληλεπίδραση της σύζευξης του κοντινού πεδίου του διμερούς και του αντίστοιχου μακρινού πεδίου, λόγω του πλέγματος. Εκμεταλλευόμενοι αυτό, είναι δυνατόν με κατάλληλη παραμετροποίηση της γεωμετρίας κάποιος να πετύχει υψηλή διέλευση στο ίδιο εύρος μηκών κύματος. Μια τέτοια διάταξη θα μπορούσε να λειτουργήσει ως ένας αποτελεσματικός διαχωριστής δέσμης, αποτελούμενος μόνο από διηλεκτρικά υλικά.

Αυτό, λοιπόν, επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας σφαίρες με ακτίνες $R_1 = 140$ nm και $R_2 = 180$ nm, οι οποίες βρίσκονται σε απόσταση 15 nm, σε ένα πλέγμα με $a_x = 850$ nm, $a_y = 400$ nm, όπως φαίνεται στο Σχ. 2.4(a). Τα φάσματα διέλευσης και ανάκλασης για φως που προσπίπτει κάθετα με πόλωση x φαίνονται στα Σχ.2.4(b,c), αντίστοιχα. Στο Σχ. 2.4(c) βλέπουμε ότι η δέσμη ανάκλασης μηδενικής τάξης $m = 0$ μειώνεται πολύ αν μετακινηθούμε από το σημείο περίθλασης $\lambda_{\text{diff}} = 850$ nm προς τα μικρότερα μήκη κύματος, ενώ η δέσμη ανάκλασης $m = +1$ κορυφώνεται κοντά στις περιοχές όπου υπάρχουν οι τετραπολικοί συντονισμοί των μεμονωμένων σφαιρών (Σχ. 2.1). Επιπλέον, παρατηρούμε μια απότομη πτώση στη δέσμη διέλευσης μηδενικής τάξης [διακεκομμένη γραμμή στο Σχ. 2.4(b)] κοντά στα 775 nm.

Στις περιοχές όπου οι απομονωμένες σφαίρες εμφανίζουν τετραπολικούς συντονισμούς Mie εμφανίζεται μηδενισμός της εμπροσθοσκέδασης, που μοιάζει με γενικευμένο σημείο Kerker δεύτερου είδους [2]. Λόγω του γεγονότος ότι η δομή είναι ισχυρά ανισοτροπική, η υπόλοιπη ενέργεια διέλευσης καθοδηγείται ολόκληρη στη δέσμη $m = +1$, κάτι που αναδεικνύεται με μια αντίστοιχη κορυφή (μπλε εστιγμένη γραμμή). Παρά το γεγονός ότι οι μέγιστες τιμές στη διέλευση και την ανάκλαση δεν βρίσκονται ακριβώς στο ίδιο μήκος κύματος, η δομή αναμένεται να δουλεύει αποδοτικά σε ένα ευρύ φάσμα μηκών κύματος. Σε $\lambda = 775$ nm, έχουμε $\mathcal{T}_{+1} \approx 42\%$ και $\mathcal{R}_{+1} \approx 40\%$.

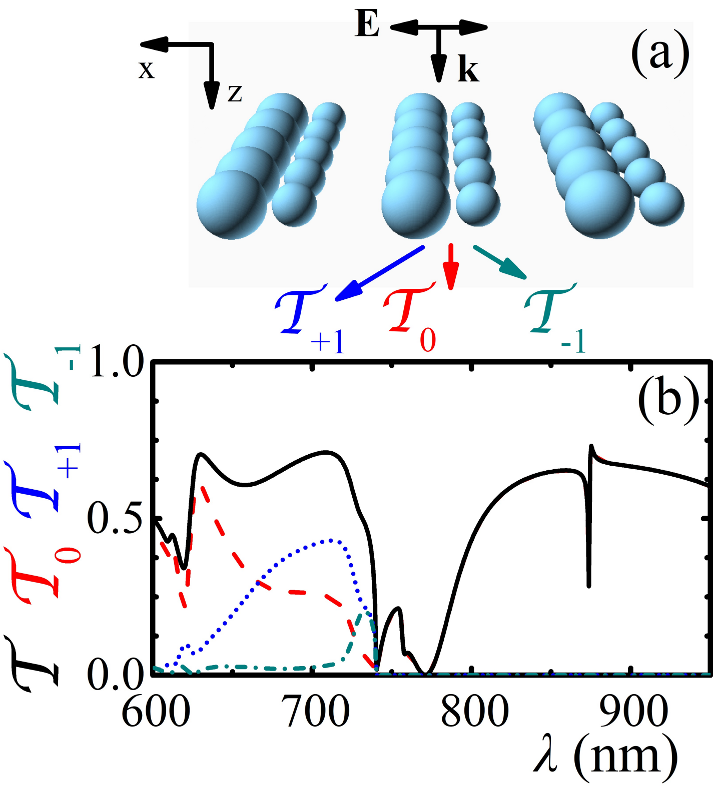
Συμπερασματικά, ο συνδυασμός μεταξύ του συντονισμού QM της μικρής σφαίρας με τον QE της μεγαλύτερης, έχει ως αποτέλεσμα το σχηματισμό υβριδικών καταστάσεων, οι οποίες καθοδηγούν το φως ασύμμετρα, σε κατευθύνσεις διαφορετικές από εκείνες του προσπίπτοντος φωτός. Στο εδάφιο 2.7, θα μελετηθεί εκτενέστερα ο πολυπολικός χαρακτήρας αυτών των υβριδικών καταστάσεων.

2.6 Περίθλαση σε μεγάλες γωνίες διέλευσης

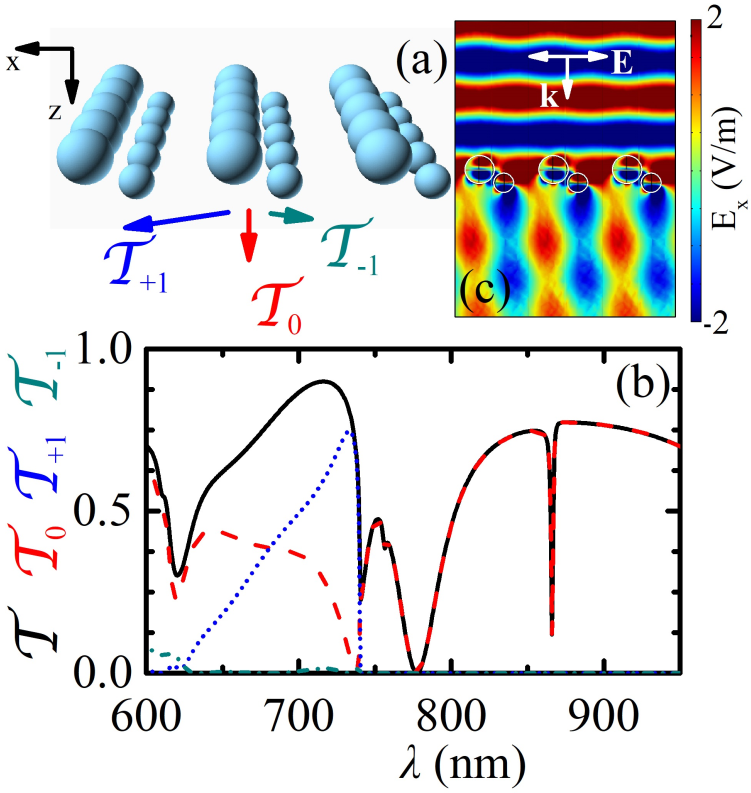
Όπως δείξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η υβριδοποίηση των συντονισμών Mie διαφορετικών σωματιδίων μπορεί να προκαλέσει ισχυρή κατευθυντική εμπροσθοσκέδαση - οπισθοσδέδαση. Το πλέγμα έχει πολύ σημαντική επιρροή στο σχηματισμό τέτοιων υβριδικών καταστάσεων. Για παράδειγμα, για σφαίρες με $R_1 = 90$ nm και $R_2 = 140$ nm σε ένα πλέγμα με $a_x = 740$ nm και $a_y = 360$ nm, περιμένουμε ο DE συντονισμός της μεγαλύτερης σφαίρας να αλληλοεπικαλύπτεται με τον DM συντονισμό της μικρότερης, λίγο κάτω από λ =740 nm, ενώ παίζει ρόλο και η συνεισφορά από τον QM της μεγαλύτερης σφαίρας (Σχ. 2.1).

Η γεωμετρία φαίνεται στο Σχ. 2.5(a) και το αντίστοιχο φάσμα για τη διέλευση και την απορρόφηση για τις διάφορες τάξεις περίθλασης, για φως με κάθετη πρόσπτωση και πόλωση x, φαίνεται στο Σχ. 2.5(b). Σε μήκη κύματος κοντά στο όριο περίθλασης, $\lambda_{\text{diff}} =$ 740 nm, η υβριδοποίηση μεταξύ των συντονισμών έχει ως αποτέλεσμα την ελαχιστοποίηση της εμπροσθοσκέδασης μηδενικής τάξης, σαν μια περίπτωση Kerker δεύτερου είδους κοντά στα 740 nm. Εκεί, η ενέργεια μεταφέρεται μέσω των καναλιών περίθλασης πρώτης τάξης. Περισσότερη ενέργεια κατευθύνεται στη δέσμη διέλευσης $m_x = +1$, ($\mathcal{T}_{+1}$) και, έτσι, το φως στρίβει προς την πλευρά των μεγαλύτερων σφαιρών. Πρέπει να αναφερθεί ότι η σκέδαση υψηλότερης τάξης ($|m_x| > 1$) είναι αμελητέα στο συγκεκριμένο εύρος μηκών κύματος που μελετάμε. Η ασυμμετρία μεταξύ των καναλιών πρώτης τάξης στην κατεύθυνση x, $\mathcal{T}_{+1}$ και $\mathcal{T}_{-1}$, μπορεί να βελτιστοποιηθεί με κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων της γεωμετρίας.

Η γεωμετρία της μοναδιαίας κυψελίδας παίζει σημαντικό ρόλο στον καθορισμό του μακρινού πεδίου της περιοδικής δομής, κάτι που είναι εμφανές αν δούμε το νέο φάσμα που προκύπτει, αν στρίψουμε τα διμερή κατά γωνία $\theta = 28^{\text{o}}$ γύρω από άξονα παράλληλο στη διεύθυνση y, η οποία διέρχεται μέσα από τα κέντρα των μεγάλων σφαιρών, όπως φαίνεται στο Σχ. 2.6(a). Η δομή είναι βελτιστοποιημένη για να εμφανίζεται μέγιστη ένταση της $m_x = +1$ δέσμης της διέλευσης και ταυτόχρονα να έχει τη μέγιστη γωνία περίθλασης. Η βελτιστοποίηση έγινε με πολλούς υπολογισμούς χρησιμοποιώντας τη μέθοδο LMS. Το αντίστοιχο φάσμα διέλευσης και ανάκλασης για τις διάφορες δέσμες περίθλασης φαίνεται στο Σχ. 2.6(b). Για φως x-πολωμένο, που προσπίπτει κάθετα, η στροφή προς την πλευρά της μεγαλύτερης σφαίρας έχει μεγιστοποιηθεί, ενώ η διαρροή στα υπόλοιπα κανάλια περίθλασης έχει ελαχιστοποιηθεί. Σε μήκη κύματος λίγο μικρότερα από 740 nm, η $\mathcal{T}_{+1}$ είναι κοντά στο



Σχήμα 2.5: (a) Ένα ορθογώνιο πλέγμα ($a_x = 740$ nm, $a_y = 360$ nm), αποτελούμενο από διμερή Si με ακτίνες $R_1 = 90$ nm και $R_2 = 140$ nm, που έχουν τα κέντρα τους στο ίδιο επίπεδο και απέχουν 20 nm κατά μήκος του άξονα x. (b) Η διέλευση που αντιστοιχεί στην παραπάνω γεωμετρία για κάθετα x-πολωμένο φως. Μαύρη γραμμή: Η συνολική διέλευση, $\mathcal{T}$. Διακεκομμένη κόκκινη γραμμή: Διέλευση της μηδενικής τάξεως περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_0$. Διακεκομμένη μπλε γραμμή: Διέλευση στο $m_x = +1$ κανάλι περίθλασης, $\mathcal{T}_{+1}$. Διακεκομμένη-εστιγμένη πράσινη γραμμή: Η διέλευση της $m_x = -1$ περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_{-1}$.



Σχήμα 2.6: (a) Ένα ορθογώνιο πλέγμα (a_x = 740 nm, a_y = 360 nm) αποτελούμενο από σφαίρες πυριτίου με ακτίνεςR_1 = 90 nm και R_2 = 140 nm, παρόμοιο με εκείνο του Σχ. 2.5(a), αλλά το διμερές έχει περιστραφεί κατά γωνία $\theta = 28^o$ γύρω από τον άξονα που περνάει από τα κέντρα των μεγάλων σφαιρών παράλληλο στη διεύθυνση y. Η απόσταση μεταξύ των σφαιρών είναι 50 nm. (b) Η διέλευση της παραπάνω γεωμετρίας για κάθετα προσπίπτον x-πολωμένο φως. Μαύρη γραμμή: Η συνολική διέλευση, $\mathcal{T}$. Διακεκομμένη κόκκινη γραμμή: Διέλευση της μηδενικής τάξεως περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_0$. Εστιγμένη μπλε γραμμή: Διέλευση στο $m_x = +1$ κανάλι περίθλασης, $\mathcal{T}_{+1}$. Διακεκομμένη-εστιγμένη πράσινη γραμμή: Η διέλευση της $m_x = -1$ περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{T}_{-1}$. (c) Το προφίλ της x συνιστώσας του ηλεκτρικού πεδίου, E_x, σε ένα x-z επίπεδο που περνάει από τα κέντρα των σφαιρών, σε μήκος κύματος $\lambda = 734$ nm.

75%, ενώ η γωνία της περίθλασης σε μήκος κύματος $\lambda = 734$ nm είναι $\varphi_{+1} = 83^{o}$.

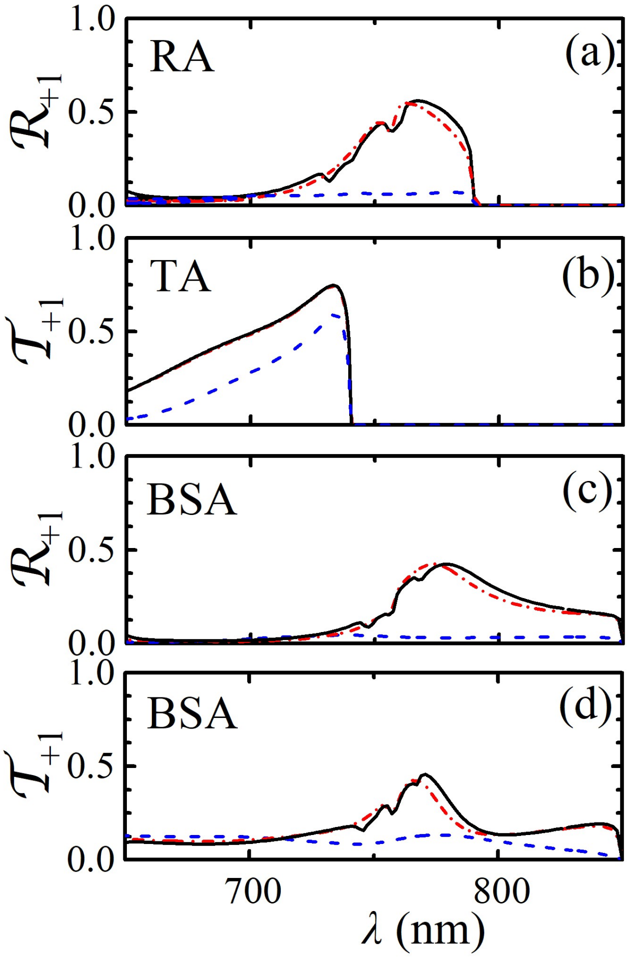
Πάλι, τα αποτελέσματά μας είναι σε απόλυτη συμφωνία με αντίστοιχους υπολογισμούς, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων (Comsol multiphysics), ενώ το αντίστοιχο υπολογισμένο ηλεκτρικό πεδίο φαίνεται στο Σχ. 2.6(c). Η ισχυρή σκέδαση στην κατεύθυνση της $m_x = +1$ διατηρείται για ένα ευρύ παράθυρο μηκών κύματος.

2.7 Πολυπολικό ανάπτυγμα

Πρέπει να τονιστεί ότι οι υπολογισμοί μας υπερτερούν από τα διπολικά μοντέλα, που συνήθως χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν την οπτική απόκριση διμερών πυριτίου παρόμοιου με του μεγέθους που μελετήσαμε [24, 25, 26] ή περιοδικών δομών τέτοιων σωματιδίων [10, 27], αφού έχουν ισχύ και για μεγαλύτερης τάξης συντονισμούς. Η επιρροή των διαφορετικών πολύπολων στο φάσμα φαίνεται στο Σχ. 2.7, όπου έχει γίνει η ανάλυση της στροφορμής της οπτικής απόκρισης του ανακλαστικού πλέγματος (reflecting array - RA), εκείνου της διέλευσης (transmitting array - TA) αλλά και του διαχωριστή δέσμης (beam-splitter array - BSA), τα οποία φαίνονται στα Σχ. 2.3, 2.6, και 2.4, αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα έχουν εξαχθεί αποκόπτοντας τα πολυπολικά αναπτύγματα του μεμονωμένου σκεδαστή στα $\ell_{\max} = 1, 2$ και 3 αντίστοιχα. Ο χαρακτήρας των συντονισμών που είναι υπεύθυνος για το φάσμα είναι εύκολο να αναγνωριστεί από την σφαιρική ανάπτυξη του πεδίου, κάτι που είναι βασικό στοιχείο της μεδόθου LMS, αλλά και με τη σύγκριση των θέσεων των συντονισμών Mie των απομονωμένων σφαιρών οι οποίες υπολογίστηκαν στο εδάφιο για την ενεργό διατομή σκέδασης (Σχ. 2.1).

Στις δομές RA και BSA [Σχ. 2.7(a), (c), και (d)] φαίνεται ότι η διπολική συνεισφορά είναι πολύ μικρή. Αντίθετα, στη γεωμετρία TA [Σχ. 2.7(b)], η συνολική συμπεριφορά μπορεί ποιοτικά να περιγραφεί μόνο από τη διπολική προσέγγιση, αφού η οπτική απόκριση καθορίζεται κυρίως από την αλληλεπίδραση του συντονισμού DE της μεγάλης σφαίρας με τον DM της μικρής, ενώ οι συνεισφορές από $\ell > 2$ είναι αμελητέες.

Σχετικά με την RA δομή, στο Σχ. 2.7(a), στο μήκος κύματος όπου εμφανίζεται ισχυρή περίθλαση, η οπτική απόκριση οφείλεται λόγω της αλληλεπικάλυψης του συντονισμού QE της μεγάλης σφαίρας ($R_2 = 175$ nm) με τους DE και QM της μικρότερης ($R_1 = 140$ nm). Έτσι, καταλαβαίνουμε ότι οι τετραπολικοί όροι ($\ell = 2$) είναι απαραίτητοι για τη σύγκλιση

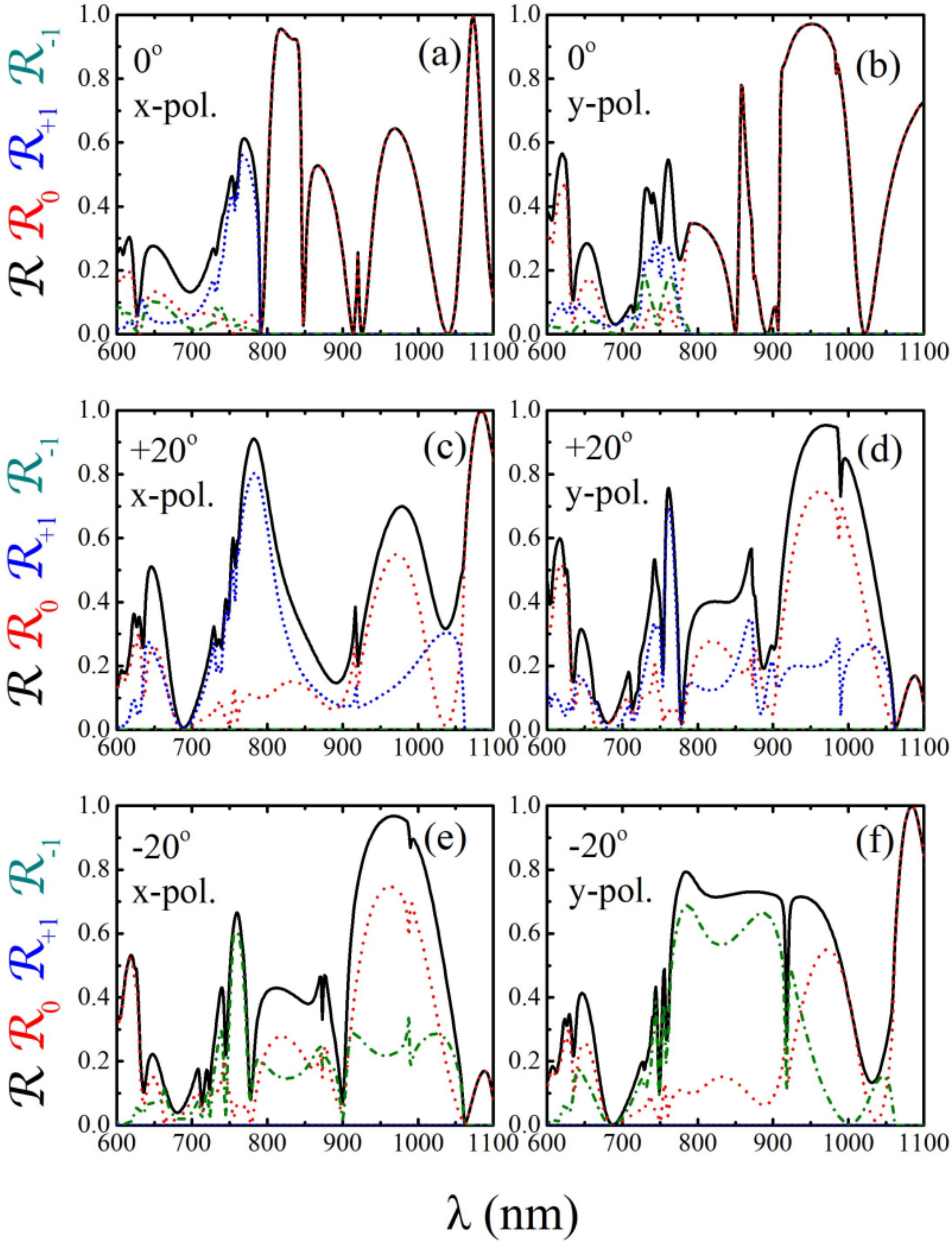


Σχήμα 2.7: (a) Η ανάκλαση της πρώτης τάξεως περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{R}_{+1}$, της RA δομής του Σχ. 2.3, υπολογισμένης χρησιμοποιώντας διαφορετικές τιμές αποκοπής της στροφορμής, $\ell_{\max} = 1$, (μπλε διακεκομμένη γραμμή), $\ell_{\max} = 2$ (κόκκινη διακεκομμένη-εστιγμένη γραμμή), $\ell_{\max} = 3$ (μαύρη γραμμή). (b) Όμοια με το (a) για την περιθλώμενη δέσμη πρώτης τάξεως $\mathcal{T}_{+1}$, της δομής TA του Σχ. 2.6. (c,d) Όμοια με το (a) για την ανάκλαση της πρώτης τάξεως περιθλώμενης δέσμης, $\mathcal{R}_{+1}$, και διέλευσης, $\mathcal{T}_{+1}$, της δομής BSA του Σχ.2.4.

των υπολογισμών σε αυτήν την περίπτωση.

Οι τετραπολικοί όροι είναι απαραίτητοι και για την BSA δομή, όπως φαίνεται στα Σχ. 2.7(c) και (d). Βλέποντας την ενεργό διατομή σκέδασης κοντά στα 750nm, εντοπίζουμε τον QE συντονισμό της μεγαλύτερης σφαίρας (R_2 =180 nm) και τον QM της μικρότερης (R_1 =140 nm). Είναι πολύ σημαντικό να τονιστεί ότι και στη δομή RA αλλά και στην BSA εμπλέκονται οι ίδιο συντονισμοί. Αυτό αποδεικνύει πόσο σημαντικό ρόλο παίζει η αλληλεπίδραση και η γεωμετρία των σωματιδίων τα οποία επηρεάζουν το κοντινό πεδίο, ειδικά όταν εμπλέκονται τετραπολικοί συντονισμοί.

Μέχρι τώρα μελετήθηκε η περίπτωση που το εισερχόμενο κύμα είναι γραμμικά πολωμένο και προσπίπτει κάθετα στη δομή και συζητήθηκε η σκέδαση που προκύπτει λόγω της χρήση κατευθυντικών ασύμμετρων σωματιδίων στο πλέγμα. Όμως, θα μπορούσαμε να αποδυναμώσουμε συγκεκριμένες τάξεις περίθλασης ρίχνοντας το εισερχόμενο κύμα υπό μια γωνία διάφορη του μηδενός, αφού το μήκος κύματος αποκοπής μιας συγκεκριμένης δέσμης περίθλασης εξαρτάται από τη γωνία πρόσπτωσης. Αυτή η ιδιότητα μας δίνει επιπλέον βαθμούς ελευθερίας για να ρυθμίσουμε τη διέγερση των διαφορετικών πολύπολων. Στο Σχ. 2.8 φαίνεται μια τέτοια περίπτωση μη κάθετης πρόσπτωσης, η οποία σε πολλές περιπτώσεις δίνει ισχυρότερη περίθλαση σε σχέση με την κάθετη πρόσπτωση. Βέβαια η συγκεκριμένη περίπτωση δεν αποτέλεσε βασικό αντικείμενο μελέτης της συγκεκριμένης διατριβής. Τέλος, πρέπει να αναφερθεί ότι τα συμπεράσματά μας δεν είναι ευαίσθητα σε μικρές μεταβολές μερικών μοιρών της γωνίας πρόσπτωσης.



Σχήμα 2.8: Η επίδραση της γωνίας πρόσπτωσης και της πόλωσης στο συντελεστή ανάκλασης των περιθλώμενων δεσμών, οι οποίες φαίνονται στο Σχ. 2.3, για ένα ορθογώνιο πλέγμα με $(a_x = 790 \text{ nm}, a_y = 400 \text{ nm})$ που αποτελείται από διμερή πυριτίου με ακτίνες $R_1 = 140$ nm και $R_2 = 175$ nm, τα οποία έχουν τα κέντρα τους στο ίδιο επίπεδο και απόσταση μεταξύ τους ίση με 15 nm κατά μήκος του άξονα x. Στα σχήματα η πόλωση x (y) αναφέρεται στην περίπτωση που το εισερχόμενο κύμα είναι πολωμένο κατά μήκος του άξονα x (y), ενώ η θετική (αρνητική) γωνία αναφέρεται στην περίπτωση που η γωνία πρόσπτωσης έχει στρίψει προς τη μεγαλύτερη (μικρότερη) σφαίρα.

2.8 Αντίστροφη σκέδαση

Όπως είδαμε παραπάνω με μικρές αλλαγές στη γεωμετρία μπορεί κάποιος να αλλάξει ριζικά την οπτική απόκριση ενός συστήματος. Επιπλέον, προηγουμένως κάναμε βελτιστοποίηση των παραμέτρων μέχρι να επιτύχουμε την μέγιστη δυνατή απόδοση, δηλαδή ισχυρή σκέδαση σε μεγάλες γωνίες. Η διαδικασία της βελτιστοποίησης είναι μια κοπιαστική δουλειά, όταν γίνεται χειροκίνητα και δεν είναι εφικτό να να πραγματοποιηθεί για πολλές παραμέτρους.

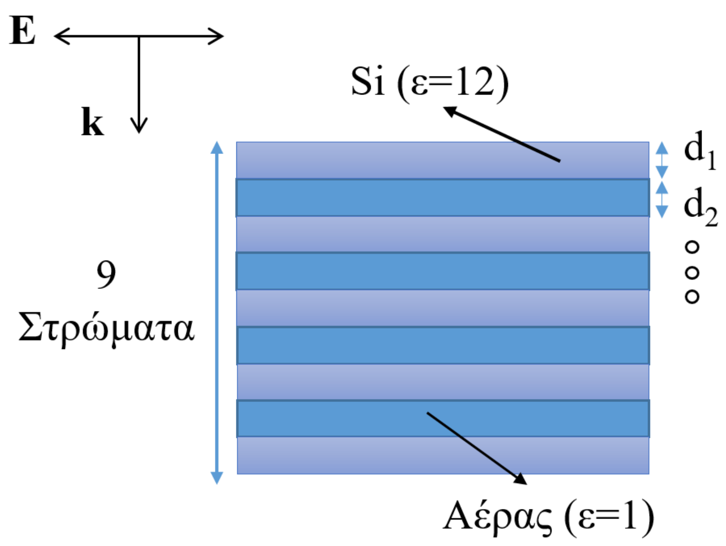
Για την επίλυση αυτής της δυσκολίας, επεκτείναμε τη μέθοδο, ώστε έχουμε την δυνατότητα να μελετήσουμε την αντίστροφη σκέδαση. Με αυτόν τον όρο εννοούμε, ότι, πλέον, έχουμε τη δυνατότητα να καθορίζουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα για οποιοδήποτε φυσικό μέγεθος επιθυμούμε (πχ. το συντελεστή διέλευσης ή ανάκλασης οποιασδήποτε περιθλώμενης δέσμης) και η μέθοδος να αναζητά τις βέλτιστες δυνατές παραμέτρους (πχ. απόσταση μεταξύ σφαιρών, θέσεις ή πλεγματική σταθερά), μεταβάλλοντας μόνο αυτές που εμείς ορίζουμε, σε επιθυμητό εύρος. Προβλήματα αντίστροφης σκέδασης μπορεί κάποιος να συναντήσει σε πολλούς επιστημονικούς τομείς όπως στην τομογραφία [28, 29], στις οπτικές ίνες Bragg [30] και στην οπτική μετρολογία [31, 32] και έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές για την επίλυση αυτών των προβλημάτων, που έχουν σκοπό την ελαχιστοποίηση κάποιας παραμέτρου. Εκτός από τις κλασσικές μαθηματικές μεθόδους ελαχιστοποίησης, τα τελευταία χρόνια έχουν χρησιμοποιηθεί και γενετικοί αλγόριθμοι [33], προσεγγίσεις βιβλιοθήκης [34] ακόμα και νευρωνικά δίκτυα [35].

Εμείς, χρησιμοποιήσαμε τη μέθοδο ελαχιστοποίησης Limited-memory Broyden–Fletcher – Goldfarb–Shanno (L-BFGS-B) [36, 37]. Είναι ένας αλγόριθμος παρόμοιος με τον Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS), αλλά δινει τη δυνατότητα επιβολής περιορισμών στις μεταβλητές. Ανήκει στην οικογένεια των quasi-Newton μεθόδων που προσεγγίζει τον αλγόριθμο BFGS χρησιμοποιώντας περιορισμένο μέγεθος μνήμης. Οι απαιτούμενες παράγωγοι υπολογίστηκαν χρησιμοποιώντας τις τιμές της μεταβολής της κάθε συνάρτησης ανά βήμα. Σκοπός μας είναι μελλοντικά να ενσωματώσουμε περισσότερο περίπλοκες τεχνικές ελαχιστοποίησης, οι οποίες δεν αποτέλεσαν αντικείμενο αυτής της διδακτορικής διατριβής.

Κάναμε, λοιπόν, εφαρμογή αυτών σε δύο διαφορετικά προβλήματα. Πρώτα σε μια πολυστρωματική δομή, αποτελούμενη από πολλά στρώματα μεταβλητού πάχους και, δεύτερον, σε ένα περιοδικό πλέγμα από σφαίρες με μεταβλητή απόσταση και θέση. Στη συνέχεια, λοιπόν, θα περιγράψουμε αυτές τις δύο περιπτώσεις.

2.8.1 Πολυστρωματική δομή

Στην πρώτη εφαρμογή ο στόχος ήταν η κατασκευή πολυστρωματικής δομής πλήρως ανακλαστικής σε μήκη κύματος από 660 nm έως 700 nm. Θεωρήσαμε ότι η δομή αποτελείται από 9 στρώματα αποτελούμενα από πυρίτιο (ε=12) εναλλασσόμενα με αέρα (Σχ. 2.9) . Ως



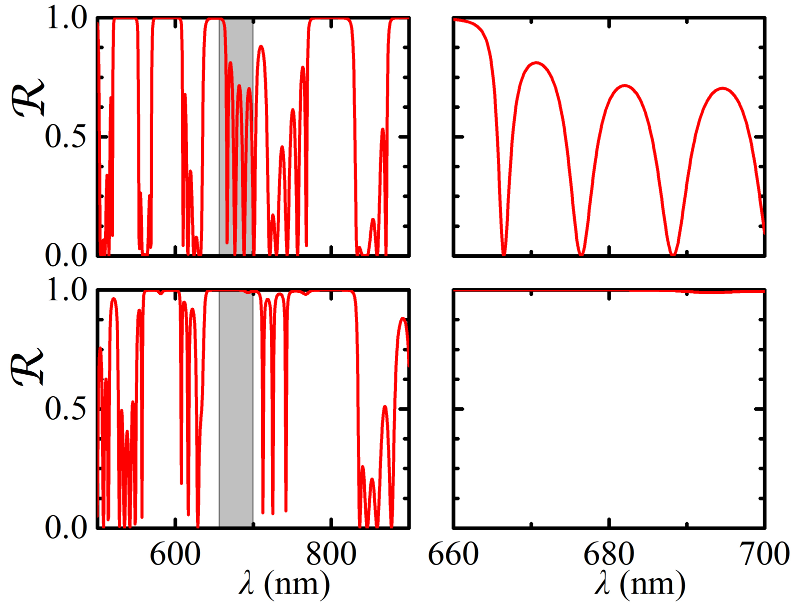
Σχήμα 2.9: Η γεωμετρία που θα βελτιστοποιήσουμε αποτελείται από συνολικά 9 στρώματα από πυρίτιο (ε=12) εναλλασσόμενα με αέρα. Τα πάχη των στρωμάτων d_1, d_2,... είναι οι μεταβλητές που θα βελτιστοποιηθούν ώστε η δομή να γίνει πλήρως ανακλαστική για τα επιθυμητά μήκη κύματος.

μεταβλητές ορίσαμε τα πάχη των στρωμάτων και ως επιθυμητό αποτέλεσμα το συντελεστή ανάκλασης να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα στη μονάδα για είκοσι συχνότητες μεταξύ 660 nm έως 700 nm, στην περίπτωση κάθετης πρόσπτωσης του φωτός. Για να το πετύχουμε αυτό, έγινε η ελαχιστοποίηση της ποσότητας

$$\sum_{i=1}^{20} \left[1 - R_i\left(d_1, d_2, \ldots d_9\right)\right]^2 , \tag{2.3}$$

όπου R_i είναι ο συντελεστής ανάκλασης για την κάθε μία συχνότητα από τις είκοσι, που αναφέρθηκαν παραπάνω, και $d_1, d_2 \dots d_9$ τα πάχη των εννέα στρωμάτων, για τα οποία ως αρχική τιμή ορίσαμε το $d = 1200nm$.

Το αντίστοιχο φάσμα της ανάκλασης για την αρχική δομή φαίνεται στο Σχ.2.10 (πάνω αριστερά) και στο πάνω δεξιά έχει γίνει μεγέθυνση στην υπό μελέτη περιοχή. Τελικά, οι βελτιστοποιημένες τιμές του πάχους όλων των στρωμάτων φαίνονται στον Πίνακα 2.1, ενώ το αντίστοιχο φάσμα της ανάκλασης φαίνεται στο Σχ.2.10 (κάτω αριστερά και μεγενθυμένο κάτω δεξιά). Παρατηρούμε ότι τελικό αποτέλεσμα είναι πάρα πολύ κοντά στο ζητούμενο, αφού ο συντελεστής ανάκλασης είναι πολύ κοντά στη μονάδα σε όλο το επιθυμητό εύρος.



Σχήμα 2.10: Στο επάνω αριστερά σχήμα φαίνεται η ανάκλαση της δομής του Σχ. 2.9 για τις αρχικές τιμές των παραμέτρων σε μήκη κύματος $500nm - 900nm$. Στο πάνω δεξιά φαίνεται το πρώτο μεγενθυμένο στα μήκη κύματος που γίνεται η βελτιστοποίηση (μεγέθυνση στην γκρι περιοχή). Τα κάτω σχήματα είναι όμοια με τα επάνω, αλλά αναφέρονται στις βελτιστοποιημένες τιμές των παραμέτρων. Σε αυτά, η ανάκλαση είναι πολύ κοντά στη μονάδα, δηλαδή στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

Παράμετροι	Αρχικές Τιμές (nm)	Βελτιστοποιημένες (nm)
d_1	1200	962
d_2	1200	506
d_3	1200	508
d_4	1200	507
d_5	1200	511
d_6	1200	507
d_7	1200	508
d_8	1200	506
d_9	1200	962

Πίνακας 2.1: Στον Πίνακα φαίνονται οι αρχικές και οι βέλτιστοποιημένες τιμές των παραμέτρων d_i, δηλαδή των παχών των στρωμάτων, έτσι ώστε ο συντελεστής ανάκλασης να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα στη μονάδα, για είκοσι συχνότητες μεταξύ 660 nm και 700 nm, για κάθετη πρόσπτωση.

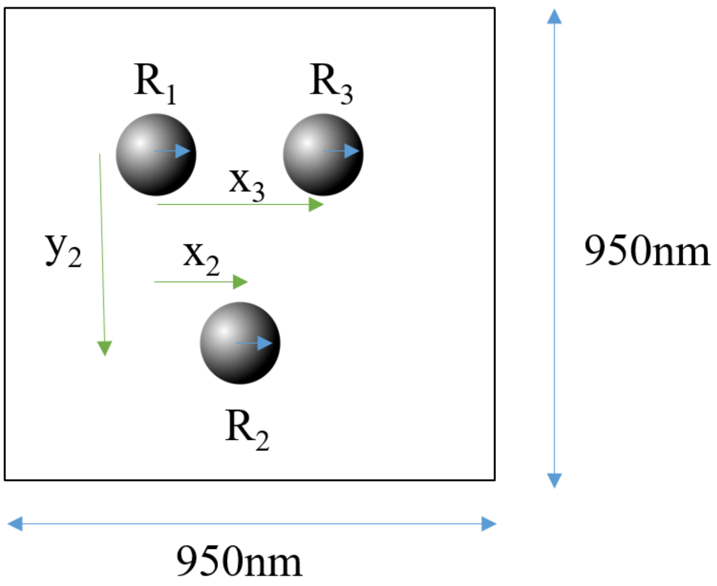
2.8.2 Πλέγμα σφαιρών

Στη δεύτερη περίπτωση εφαρμόσαμε τον μέθοδο αντίστροφης σκέδασης σε ένα τετραγωνικό πλέγμα με τρεις σφαίρες ανά κυψελίδα, με σκοπό την κατασκευή μιας γεωμετρίας με μέγιστη διέλευση σε δεδομένα μήκη κύματος. Η πλεγματική σταθερά ήταν ίση με $950nm$, ενώ η βελτιστοποίηση πραγματοποιήθηκε με παραμέτρους τις ακτίνες των τριών σφαιρών αλλά και τις θέσεις τους x, y πάνω στο επίπεδο του πλέγματος, με σκοπό τη μεγιστοποίηση του πλάτους διέλευσης σε ένα εύρος μηκών κύματος $760nm - 770nm$, για κάθετη πρόσπτωση στη δομή φωτός, με πόλωση κατά μήκος του άξονα x, χρησιμοποιώντας 5 σημεία για τη διαδικασία. Συγκεκριμένα, έγινε η ελαχιστοποίηση της παρακάτω ποσότητας

$$\sum_{i=1}^{5} \left[1 - T_i\left(x_2, x_3, y_2, R_1, R_2, R_3\right)\right]^2, \qquad (2.4)$$

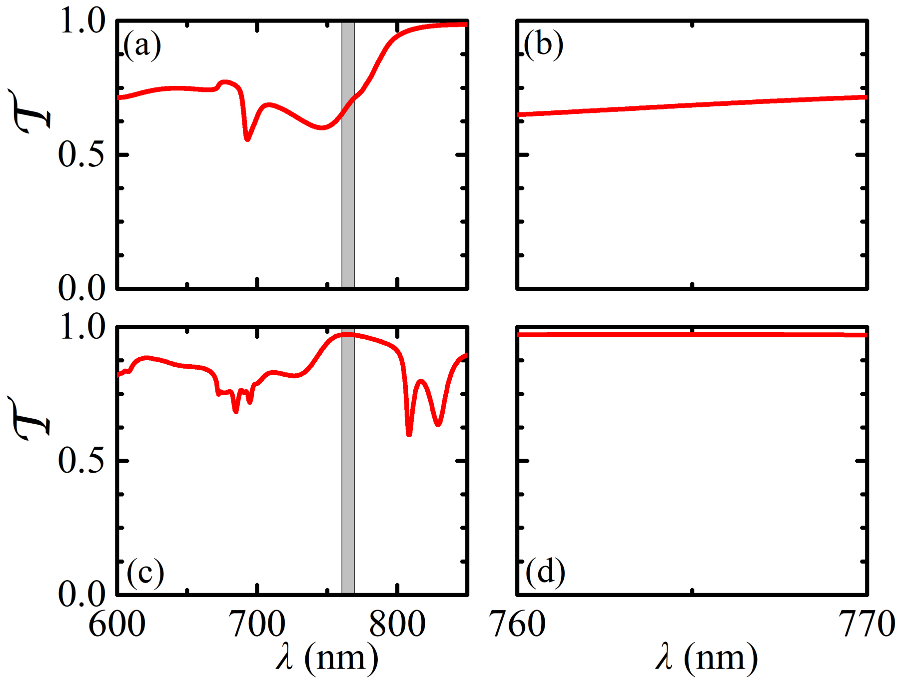
όπου T_i ο συντελεστής διέλευσης για καθεμιά από τις πέντε συχνότητες που αναφέρθηκαν και x_j, y_j, R_j η θέση πάνω στο επίπεδο και η ακτίνα για την αντίστοιχη σφαίρα j. Ως αρχικές τιμές, θεωρήσαμε τις ακτίνες όλων των σφαιρών ίσες με $100nm$ και τις συντεταγμένες τους

x, y όπως φαίνονται στο Σχ.2.11. Το αντίστοιχο φάσμα της διέλευσης, για την αρχική δομή, φαίνεται στο Σχ.2.12(a), ενώ στο (b) έχει γίνει μεγέθυνση στην υπό μελέτη περιοχή.



Σχήμα 2.11: Η δεύτερη γεωμετρία που θα βελτιστοποιήσουμε είναι ένα τετραγωνικό πλέγμα με τρεις σφαίρες ανά κυψελίδα. Στο σχήμα φαίνεται η μοναδιαία κυψελίδα και οι θέσεις των τριών σφαιρών, ενώ η αρχική ακτίνα όλων των σφαιρών είναι $100nm$.

Τελικά, οι βελτιστοποιημένες παράμετροι φαίνονται στον Πίνακα 2.2 και το αντίστοιχο διάγραμμα του συντελεστή διέλευσης Σχ.2.12(c) και στο (d). Και σε αυτήν την περίπτωση βλέπουμε ότι τα αποτελέσματα είναι ικανοποιητικά.



Σχήμα 2.12: (a) Η διέλευση της δομής του Σχ. 2.11 για τις αρχικές τιμές των παραμέτρων σε μήκη κύματος $600nm - 900nm$. (b) Το ίδιο με το (a) αλλά μεγεθυμένο στα μήκη κύματος που γίνεται η βελτιστοποίηση (μεγέθυνση στην γκρι περιοχή). (c),(d) Όμοια με τα (a),(b) αλλά αναφέρονται στις βελτιστοποιημένες τιμές των παραμέτρων. Η διέλευση είναι πολύ κοντά στη μονάδα, δηλαδή στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

Παράμετροι	Αρχικές Τιμές (nm)	Βελτιστοποιημένες (nm)
x_2	300	270
x_3	300	205
y_2	300	353
R_1	100	73
R_2	100	198
R_3	100	72

Πίνακας 2.2: Στον Πίνακα φαίνονται οι αρχικές και οι βέλτιστοποιημένες τιμές των παραμέτρων, έτσι ώστε ο συντελεστής διέλευσης να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα στη μονάδα, για πέντε συχνότητες μεταξύ 760 nm και 770 nm, για κάθετη πρόσπτωση.

2.9 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, μελετήσαμε την προοπτική χρήσης περιοδικών δομών από σωματίδια που εμφανίζουν πολυπολικούς συντονισμούς Mie στην ανάπτυξη μεταεπιφανειών που μπορούν να ελέγχουν το κυματομέτωπο. Συγκεκριμένα, τονίσαμε το σημαντικό ρόλο των υβριδικών καταστάσεων με κυρίαρχο τον τετραπολικό χαρακτήρα σε περιοδικά πλέγματα αποτελούμενα μόνο από διηλεκτρικά υλικά στην περίπτωση που επιτρέπεται η περίθλαση. Δείξαμε ότι ένα πλέγμα αποτελούμενο από ασύμμετρα διμερή πυριτίου μπορεί να καθοδηγήσει φως που προσπίπτει κάθετα στην επιφάνειά του, με τρεις διαφορετικούς τρόπους. Οι υπολογισμοί έγιναν χρησιμοποιώντας τη μέθοδο LMS ταυτόχρονα με την μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων (Comsol). Παρόμοιες δυνατότητες έχουν αναφερθεί ξανά, αλλά χρησιμοποιώντας άλλες τεχνικές, οι οποίες είναι κατάλληλες για μικροκύματα [38], ενώ η δική μας προσέγγιση είναι κατάλληλη για εφαρμογές στο ορατό και στο κοντινό υπέρυθρο φάσμα. Η δική μας μελέτη βασίστηκε σε χρήση διηλεκτρικών σωματιδίων σε πολύ κοντινή απόσταση, στα οποία υπάρχει μεγάλη αλληλεπίδραση μεταξύ των πολυπολικών συντονισμών Mie, στο πλέγμα. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι οι δομές που μελετήθηκαν, ειδικά το πλέγμα TA, έχουν παρόμοιες και σε μερικές περιπτώσεις καλύτερες αποδόσεις σε σχέση με άλλες δομές που έχουν προταθεί [18, 22, 39, 40]. Οι αρχές που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή των γεωμετριών που αναφέρθηκαν, οι οποίες στηρίζονται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρικών και μαγνητικών συντονισμών Mie, ισχύουν και στην περίπτωση που οι σκεδαστές είναι κύλινδροι, ή ακόμα και για πιο σύνθετα σωματίδια, πάνω σε υπόστρωμα. Τέλος, παρουσιάστηκε μια αρχική ενσωμάτωση της μεθόδου αντίστροφης σκέδασης στον υπάρχοντα κώδικα, η οποία έδωσε ενθαρρυντικά αποτελέσματα.

Βιβλιογραφία

[1] W. Liu and Y. S. Kivshar, Opt. Express **26**, 13085-13105 (2018).

[2] J. M. Geffrin, B. García-Cámara, R. Gómez-Medina, P. Albella, L. S. Froufe-Pérez, C. Eyraud, A. Litman, R. Vaillon, F. González, M. Nieto-Vesperinas, J. J. Sáenz, and F. Moreno, Nat. Commun. **3**, 1171 (2012).

[3] H. Y. Fu, A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. F. Yu, B. Luk'yanchuk, Nat. Commun. **4**, 1527 (2013).

[4] M. I. Tribelsky, J. M. Geffrin, A. Litman, C. Eyraud, and F. Moreno, Sci. Rep. **5**, 12288 (2015).

[5] H. K. Shamkhi, K. V. Baryshnikova, A. Sayanskiy, P. Kapitanova, P. D. Terekhov, P. Belov, A. Karabchevsky, A. B. Evlyukhin, Y. Kivshar, and A. S. Shalin, Phys. Rev. Lett. **122**, 193905 (2019).

[6] S. Bidault, M. Mivelle, and N. Bonod, J. Appl. Phys. **126**, 094104 (2019).

[7] P. Albella, M. A. Poyli, M. K. Schmidt, S. A. Maier, F. Moreno, J. J. Sáenz, and J. Aizpurua, Phys. Chem. C **117**, 13573-13584 (2013).

[8] T. Shibanuma, S. A. Maier, and P. Albella, Appl. Phys. Lett. **112**, 063103 (2018).

[9] A. Mirzaei, A. E. Miroshnichenko, Nanoscale **7**, 5963-5968 (2015).

[10] V. E. Babicheva, M. I. Petrov, K. V. Baryshnikova, and P. A. Belov, J. Opt. Soc. Am. B **34**, D18-D28 (2017).

[11] D. E. Aspnes, in EMIS Datareviews (Inspec IEE, 1988).

[12] A. E. Minovich, A. E. Miroshnichenko, A. Y. Bykov, T. V. Murzina, D. N. Neshev, and Y. S. Kivshar, Laser Photon. Rev. **9**, 195-213 (2015).

[13] R. Paniagua-Domınguez, Y. F. Yu, A. E. Miroshnichenko, L. A. Krivitsky, Y. H. Fu, V. Valuckas, L. Gonzaga, Y. T. Toh, A. Yew Seng Kay, B. Lukyanchuk and A. I. Kuznetsov, Nat. Commun. **7**, 10362 (2016).

[14] B. Slovick, Z. G. Yu, M. Berding, and S. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **88**, 165116 (2013).

[15] R. Dezert, P. Richetti, and A. Baron, Opt. Express **27**, 26317-26330 (2019).

[16] M. L. Tseng, H. Hsiao, C. H. Chu, M. K. Chen, G. S. A. Liu, and D. P. Tsai, Adv. Opt. Mater. **6**, 1800554 (2018).

[17] Z. Li, E. Palacios, S. Butun, and K. Aydin, Nano Lett. **15**, 1615-1621 (2015).

[18] Z. Fan, M. R. Shcherbakov, M. Allen, J. Allen, B. Wenner, and G. Shvets, ACS Photon. **5**, 4303-4311 (2018).

[19] H. Chalabi, Y. Ra'di, D. L. Sounas, and A. Alù, Phys. Rev. B **96**, 075432 (2017).

[20] W. Liu, Phys. Rev. Lett. **119**, 123902 (2017).

[21] Y. F. Yu, A. Y. Zhu, R. Paniagua-Domínguez, Y. H. Fu, B. Luk'yanchuk, and A. I. Kuznetsov, Laser Photon. Rev. **9**, 412–418 (2015).

[22] R. Paniagua-Domínguez, Y. F. Yu, E. Khaidarov, S. Choi, V. Leong, R. M. Bakker, X. Liang, Y. H. Fu, V. Valuckas, L. A. Krivitsky, and A. I. Kuznetsov, Nano Lett. **18**, 2124-2132 (2018).

[23] F. Monticone, N. M. Estakhri, and A. Alù, Phys. Rev. Lett. **110**, 203903 (2013).

[24] P. Albella, T. Shibanuma, and S. A. Maier, Sci. Rep. **5**, 18322 (2015).

[25] T. Shibanuma, P. Albella, and S. A. Maier, Nanoscale **8**, 14184-14192 (2016).

[26] U. Zywietz, M. K. Schmidt, A. B. Evlyukhin, C. Reinhardt, J. Aizpurua, and B. N. Chichkov, ACS Photon. **2**, 913-920 (2015).

[27] Y. Ra'di, D. L. Sounas, and A. Alù, Phys. Rev. Lett. **119**, 067404 (2017).

[28] Xu, M. H. & Wang, L. V. Universal back-projection algorithm for photoacoustic computed tomography. Phys. Rev. E. 71, 016706 (2005).

[29] Goy, A. et al. High-resolution limited-angle phase tomography of dense layered objects using deep neural networks. Proc. Natl Acad. Sci. USA. 116, 19848–19856 (2019).

[30] Li, H. P. et al. Advances in the design and fabrication of high-channel-count fiber Bragg gratings. J. Lightwave Technol. 25, 2739–2750 (2007).

[31] Kim, Y. N. et al. Device based in-chip critical dimension and overlay metrology. Opt. Express. 17, 21336–21343 (2009)

[32] Qin, J. et al. Deep subwavelength nanometric image reconstruction using Fourier domain optical normalization. Light. Sci. Appl. 5, e16038 (2016).

[33] Froemming, N. S. & Henkelman, G. Optimizing core-shell nanoparticle catalysts with a genetic algorithm. J. Chem. Phys. 131, 234103 (2009).

[34] Paz, V. F. et al. Solving the inverse grating problem by white light interference Fourier scatterometry. Light. Sci. Appl. 1, e36 (2012).

[35] Li, T., Chen, A., Fan, L. et al. Photonic-dispersion neural networks for inverse scattering problems. Light Sci Appl 10, 154 (2021).

[36] Byrd, R. H.; Lu, P.; Nocedal, J.; Zhu, C. (1995). "A Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization". SIAM J. Sci. Comput. 16 (5): 1190–1208.

[37] Liu, D.C., Nocedal, J. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. Mathematical Programming 45, 503–528 (1989).

[38] A. Epstein and G. V. Eleftheriades, Phys. Rev. Lett. **117**, 256103 (2016).

[39] D. Sell, J. Yang, S. Doshay, R. Yang, and J. A. Fan, Nano Lett. **17**, 3752-3757 (2017).

[40] E. Khaidarov, H. Hao, R. Paniagua-Domínguez, Y. F. Yu, Y. H. Fu, V. Valuckas, S. L. K. Yap, Y. T. Toh, J. S. K. Ng, and A. I. Kuznetsov, Nano Lett. **17**, 6267-6272 (2017).

Κεφάλαιο 3

Σκέδαση από δυναμικά μεταβαλλόμενη σφαίρα

3.1 Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια η διάδοση Η/Μ κυμάτων σε χρονικά μεταβαλλόμενο περιβάλλον έχει κεντρίσει το ενδιαφέρον και αποτελεί κομμάτι από ένα ευρύ φάσμα ερευνητικής δραστηριότητας [1]. Ο Morgenthaler, στη δεκαετία του 50, ασχολήθηκε με μονοχρωματικά κύματα διαδιδόμενα σε μέσο με μεταβλητή ταχύτητα φάσης [2], ενώ άλλες ομάδες [3, 4, 5, 6, 7] μελέτησαν πολλές άλλες πτυχές της διάδοσης Η/Μ κυμάτων σε χρονικά μεταβαλλόμενα μέσα. Ο χρόνος μπορεί να θεωρηθεί σαν ένας επιπλέον βαθμός ελευθερίας που δίνει τη δυνατότητα σε κάποιον να διαμορφώσει το κυματομέτωπο και να ελέγξει την αλληλεπίδραση φωτός με την ύλη. Τα τελευταία χρόνια, με την εμφάνιση των χρονικά-περιοδικών ή όπως αποκαλούνται χρονικών κρυστάλλων Floquet [8, 9, 10, 11, 12, 13], το συγκεκριμένο πεδίο απέκτησε ξανά μεγάλο ενδιαφέρον.

Για εφαρμογές στο ορατό/κοντινό-υπέρυθρο φάσμα, ο δυναμικός έλεγχος της διηλεκτρικής σταθεράς του μέσου μπορεί να γίνει μέσω ελαστικών ή κυμάτων σπιν ή ακόμα και ηλεκτροοπτικά, με την εφαρμογή εξωτερικής τάσης. Για παράδειγμα, χρονική μεταβολή στις ιδιότητες οπτικών κοιλοτήτων μπορεί να επιτευχθεί με τη βοήθεια φωνονίων [14, 15, 16] ή μαγνονίων [17, 18, 19, 20], ή και με συνδυασμούς με άλλα πεδία, όπως μαγνομηχανικές κοιλότητες [21], ηλεκτρομηχανικές [22], και ηλεκτρο-οπτομηχανικές [23]. Ένας κοινός δρόμος για το συνδυασμό οπτικής με τη δυναμική διέγερση άλλων κυματικών πεδίων στηρίζεται σε καταστάσεις ψιθυρισμού θόλου (whispering gallery mode - WGM), αφού περιορίζουν ισχυρά το Η/Μ πεδίο σε υψηλής ποιότητας συντονισμούς και, ταυτόχρονα, μπορούν εύκολα να αναδειχθούν πειραματικά με τη βοήθεια της φασματοσκοπίας σκέδασης Brillouin.

Έχουν πραγματοποιηθεί σχετικές μελέτες στις WGM οπτομηχανικές κοιλότητες [24, 25, 26, 27, 28] και για τις οπτομαγνονικές [29, 30, 31, 32]. Όμως οι οπτικοί WGM συντονιστές έχουν καταστάσεις με μεγάλη χωρική έκταση (modal volume), που μεταφράζεται σε πιο ασθενή οπτομηχανική και οπτομαγνονική σύζευξη συγκρίνοντας με σκεδαστές Mie νάνο-μίκρο μεγέθους. Γι΄ αυτό το λόγο έχουν γίνει προσπάθειές για το σχεδιασμό συντονιστών μικρότερου μεγέθους που παρουσιάζουν οπτικούς συντονισμούς *Mie* [33, 34, 35] ([36]).

Επιπλέον, έχουν πραγματοποιηθεί πολλές μελέτες για την αλληλεπίδραση κυμάτων με δυναμικά μεταβαλλόμενους σκεδαστές, μεταξύ των οποίων μια γενίκευση της πολλαπλής σκέδασης σε χρονικά μεταβαλλόμενους ελαστικούς σκεδαστές [37] και η θεωρητική μελέτη χωροχρονικά μεταβαλλόμενου κυκλοφορητή υπερήχων [38]. Πρόσφατα, έγινε και η μελέτη σκέδασης φωτός από σφαίρα με χρονικά περιοδικά μεταβαλλόμενο δείκτη διάθλασης [39, 40, 41]. Εμείς πραγματοποιήσαμε παρόμοια μελέτη, αλλά για σφαίρα της οποίας η ακτίνα ταλαντώνεται περιοδικά με το χρόνο. Επιπλέον, μελετήθηκε και η περίπτωση ταλάντωσης με απόσβεση, θεωρώντας περιοδικούς παλμούς φθινουσών ταλαντώσεων [37].

Η αλληλεπίδραση μεταξύ των οπτικών συντονισμών Mie και της ταλάντωσης της ακτίνας μιας διηλετρικής σφαίρας μεγέθους τάξης ενός μικρού έχει μελετηθεί [33], χρησιμοποιώντας την αδιαβατική - ημιστατική προσέγγιση. Αυτή, ισχύει για συχνότητες ταλάντωσης πολύ μικρότερες από τον ρυθμό απώλειας των φωτονίων (photon decay rate), ενώ μια πλήρως δυναμική προσέγγιση απαιτείται πέρα από αυτό το όριο. Γι΄ αυτό το λόγο αναπτύξαμε μια δυναμική μέθοδο (Floquet) για ομογενή σφαίρα με χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα. Η μέθοδος αυτή υπολογίζει τους σφαιρικούς συντελεστές ανάπτυξης της ελαστικής και των ανελαστικών δεσμών που γεννιούνται από ένα εισερχόμενο κύμα. Σε αυτή την περίπτωση υπάρχει μεταφορά ενέργειας μεταξύ του ΗΜ κύματος και της ταλάντωσης, η οποία περιγράφεται πλήρως από την δυναμική προσέγγιση. Στη συνέχεια, λοιπόν, θα κάνουμε μια αναλυτική περιγραφή της μεθόδου Floquet για την περίπτωση της σκέδασης ΗΜ κύματος από σφαίρα με χρονικά περιοδικά μεταβαλλόμενη ακτίνα.

3.2 Σκέδαση από σφαίρα με περιοδικά μεταβαλλόμενη ακτίνα

Η σκέδαση Η/Μ κύματος από ομογενή σφαίρα με περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα, $R(t) = R(t+T)$, μπορεί να περιγραφεί με τη μέθοδο του πίνακα σκέδασης $\mathbf{T}$. Υποθέτουμε ότι η σφαίρα έχει σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ_{M} και σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ_{M}, ενώ περιβάλλεται από ομογενές μέσο με σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ και μαγνητική διαπερατότητα μ, αντίστοιχα. Σε ένα περιοδικά μεταβαλλόμενο μέσο η ηλεκτρική συνιστώσα του Η/Μ κύματος μπορεί να γραφεί στη μορφή Floquet

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{Re}\left[\mathbf{E}^{(n)}(\mathbf{r}) \exp\left(-i\omega_n t\right)\right]. \tag{3.1}$$

Το ίδιο ισχύει και για τη μαγνητική συνιστώσα $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$. Η περίοδος T των ταλαντώσεων καθορίζει τις συχνότητες που θα έχουν οι δέσμες που θα προκύψουν από τη σκέδαση και συγκεκριμένα $\omega_n = \omega - n\Omega$ είναι η Floquet ψευδοσυχνότητα, ω η συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός, $\Omega = 2\pi/T$, και $n = 0, \pm 1, \pm 2 ...$. Η ηλεκτρική και η μαγνητική συνιστώσα του εισερχόμενου Η/Μ πεδίου $(\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0)$ αναπτύσσονται σε βάση σφαιρικών κυμάτων

$$\mathbf{E}_0^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\left[\frac{i}{k_n} a_{E\ell m}^{0(n)} \nabla \times j_\ell(k_n r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{H\ell m}^{0(n)} j_\ell(k_n r)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] \tag{3.2}$$

$$\mathbf{H}_0^{(n)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}} \sum_{\ell=1}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\left[a_{E\ell m}^{0(n)} j_\ell(k_n r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{k_n} a_{H\ell m}^{0(n)} \nabla \times j_\ell(k_n r)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right], \tag{3.3}$$

όπου $k_n = \omega_n\sqrt{\epsilon\mu}/c$ είναι ο αντίστοιχος κυματαριθμός. Το σκεδαζόμενο πεδίο $(\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}, \mathbf{H}_{\mathrm{sc}})$, μπορεί να γραφεί με παρόμοιο τρόπο με την εξ. (3.1), ενώ η σφαιρική του ανάπτυξη είναι ανάλογη των εξ. (3.2), (3.3) με συντελεστές ανάπτυξης $a_{P\ell m}^{+(n)}, P = E, H$, αντί για $a_{P\ell m}^{0(n)}$, και σφαιρικές συναρτήσεις Hankel, h_ℓ^+, οι οποίες είναι κατάλληλες για εξερχόμενα κύματα, αντί για τις σφαιρικές Bessel, j_ℓ. Τέλος, το πεδίο μέσα στο σωματίδιο $(\mathbf{E}_{\mathrm{M}}, \mathbf{H}_{\mathrm{M}})$ εκφράζεται, όμοια, στη μορφή των εξ. (3.1), (3.2), (3.3), με συντελεστές ανάπτυξης $a_{P\ell m}^{\mathrm{M}(n)}$ και κυματαριθμό $q_n = \omega_n\sqrt{\epsilon_{\mathrm{M}}\mu_{\mathrm{M}}}/c$ αντί για k_n σαν όρισμα των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel.

Εδώ πρέπει να τονιστεί ότι μελετάμε την περίπτωση όπου η στιγμιαία ταχύτητα της επιφάνειας της σφαίρας είναι αμελητέα σε σχέση με την ταχύτητα διάδοσης του φωτός στο κενό και για αυτό το λόγο μπορούμε, παρόμοια με τις (1.36)-(1.39), να γράψουμε για τη συνέχεια της εφαπτομενικής συνιστώσας του (μιγαδικού) Η/Μ πεδίου στην ταλαντούμενη επιφάνεια της σφαίρας, για κάθε χρόνο t

$$\mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{\rm sc} - \mathbf{E}_{\rm M}) = 0 \tag{3.4}$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \cdot (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{\rm sc} - \mathbf{E}_{\rm M}) = 0 \tag{3.5}$$

$$\mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\rm sc} - \mathbf{H}_{\rm M}) = 0 \tag{3.6}$$

$$[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})] \cdot (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\rm sc} - \mathbf{H}_{\rm M}) = 0\ . \tag{3.7}$$

Μπορούμε να εκμεταλλευτούμε τις ακόλουθες ιδιότητες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών

$$\int \mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}) d\hat{\mathbf{r}} = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{3.8}$$

$$\int \Big[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\Big] \cdot \mathbf{X}_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}) d\hat{\mathbf{r}} = 0 \tag{3.9}$$

$$\int \{\mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \Big[\nabla \times f_{\ell'}(kr)\mathbf{X}_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}})\Big] d\hat{\mathbf{r}} = 0 \tag{3.10}$$

$$\int \Big[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\Big] \cdot \Big[\nabla \times f_{\ell'}(kr)\mathbf{X}_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}})\Big] d\hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Big[r f_{\ell'}(kr)\Big]\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\ , \tag{3.11}$$

όπου f_ℓ μπορεί να είναι οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel και Hankel. Ολοκληρώνοντας την εξ.(3.4) στη στερεά γωνία $d\hat{\mathbf{r}}$, με τη βοήθεια των παραπάνω ιδιοτήτων, προκύπτει

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[a^{0(n)}_{H\ell m}j_\ell(k_nR(t))+a^{+(n)}_{H\ell m}h^+_\ell(k_nR(t))-a^{\mathrm{M}(n)}_{H\ell m}j_\ell(q_nR(t))\right]\exp\left(-i\omega_nt\right)=0\ . \quad (3.12)$$

Παρόμοιες εξισώσεις προκύπτουν και από τις υπόλοιπες συνοριακές συνθήκες. Στη συνέχεια, γίνεται η ανάπτυξη των σφαιρικών Bessel και Hankel, οι οποίες περιέχουν χρονικά εξαρτώμενο όρισμα, σε σειρά Fourier

$$j_\ell(k_nR(t))=\sum_{p=-\infty}^{\infty}A^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.13)$$

$$h^+_\ell(k_nR(t))=\sum_{p=-\infty}^{\infty}B^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.14)$$

$$j_\ell(q_nR(t))=\sum_{p=-\infty}^{\infty}C^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.15)$$

και

$$\frac{\partial}{\partial r}[rj_\ell(q_nr)]_{r=R(t)}=\sum_{p=-\infty}^{\infty}D^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}[rh^+_\ell(k_nr)]_{r=R(t)}=\sum_{p=-\infty}^{\infty}E^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}[rj_\ell(k_nr)]_{r=R(t)}=\sum_{p=-\infty}^{\infty}F^{(\ell)}_{p,n}\exp\left(ip\Omega t\right) \quad (3.18)$$

και θέτοντας $n'=n+p$, προκύπτουν οι ακόλουθες τέσσερις γραμμικές εξισώσεις, για κάθε n', l, m

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(-B^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{+(n)}_{H\ell m}+C^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{\mathrm{M}(n)}_{H\ell m}\Big)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}A^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{0(n)}_{H\ell m} \quad (3.19)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(-E^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{+(n)}_{H\ell m}+\frac{\mu}{\mu_{\mathrm{M}}}D^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{\mathrm{M}(n)}_{H\ell m}\Big)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}F^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{0(n)}_{H\ell m} \quad (3.20)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(-B^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{+(n)}_{E\ell m}+\sqrt{\frac{\epsilon_{\mathrm{M}}\mu}{\epsilon\mu_{\mathrm{M}}}}C^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{\mathrm{M}(n)}_{E\ell m}\Big)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}A^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{0(n)}_{E\ell m} \tag{3.21}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(-E^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{+(n)}_{E\ell m}+\sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_{\mathrm{M}}\mu_{\mathrm{M}}}}D^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{\mathrm{M}(n)}_{E\ell m}\Big)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}F^{(\ell)}_{n'-n,n}a^{0(n)}_{E\ell m}. \tag{3.22}$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι, αφού η σφαιρική συμμετρία του ταλαντούμενου σωματιδίου διατηρείται, οι συντονισμοί που αντιστοιχούν σε διαφορετικές πολώσεις (E,H) και σε στροφορμές (ℓ) είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους, ενώ το m δεν παίζει ουσιαστικό ρόλο. Επίσης πρέπει να αναφερθεί ότι ο υπολογισμός των συντελεστών Fourier έγινε στη Fortran με τη χρήση κατάλληλης ρουτίνας. Ορίζοντας τους πίνακες block $\mathbf{M}^{(\ell)}$ με στοιχεία $M^{(\ell)}_{n'-n,n}$, για $M\equiv A,B,C,D,E,F$, με διαστάσεις $(2N+1)\times(2N+1)$, το σύστημα των εξισώσεων μπορεί να πάρει τη μορφή πινάκων

$$\begin{pmatrix}-\mathbf{B}^{(\ell)} & \mathbf{C}^{(\ell)}\\ -\mathbf{E}^{(\ell)} & \frac{\mu}{\mu_{\mathrm{M}}}\mathbf{D}^{(\ell)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{a}^{+}_{H\ell m}\\ \mathbf{a}^{\mathrm{M}}_{H\ell m}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{A}^{(\ell)}\mathbf{a}^{0}_{H\ell m}\\ \mathbf{F}^{(\ell)}\mathbf{a}^{0}_{H\ell m}\end{pmatrix} \tag{3.23}$$

$$\begin{pmatrix}-\mathbf{B}^{(\ell)} & \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathrm{M}}\mu}{\epsilon\mu_{\mathrm{M}}}}\mathbf{C}^{(\ell)}\\ -\mathbf{E}^{(\ell)} & \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_{\mathrm{M}}\mu_{\mathrm{M}}}}\mathbf{D}^{(\ell)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{a}^{+}_{E\ell m}\\ \mathbf{a}^{\mathrm{M}}_{E\ell m}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{A}^{(\ell)}\mathbf{a}^{0}_{E\ell m}\\ \mathbf{F}^{(\ell)}\mathbf{a}^{0}_{E\ell m}\end{pmatrix}, \tag{3.24}$$

όπου $\mathbf{a}^{0,+,\mathrm{M}}_{P\ell m}\equiv[a^{0,+,\mathrm{M}(-N)}_{P\ell m},a^{0,+,\mathrm{M}(-N+1)}_{P\ell m}\dots,a^{0,+,\mathrm{M}(N)}_{P\ell m}]^T$ είναι διανύσματα στήλη διάστασης $2N+1$.

Λύνοντας για τους συντελεστές του σκεδαζόμενου πεδίου προκύπτει

$$\mathbf{a}^{+}_{H\ell m}=\left[\frac{\mu}{\mu_M}\mathbf{B}^{(\ell)}-\mathbf{C}^{(\ell)}\Big(\mathbf{D}^{(\ell)}\Big)^{-1}\mathbf{E}^{(\ell)}\right]^{-1}\left[\mathbf{C}^{(\ell)}\Big(\mathbf{D}^{(\ell)}\Big)^{-1}\mathbf{F}^{(\ell)}-\frac{\mu}{\mu_M}\mathbf{A}^{(\ell)}\right]\mathbf{a}^{0}_{H\ell m} \tag{3.25}$$

$$\mathbf{a}^{+}_{E\ell m}=\left[\mathbf{B}^{(\ell)}-\frac{\epsilon_{\mathrm{M}}}{\epsilon}\mathbf{C}^{(\ell)}\Big(\mathbf{D}^{(\ell)}\Big)^{-1}\mathbf{E}^{(\ell)}\right]^{-1}\left[\frac{\epsilon_{\mathrm{M}}}{\epsilon}\mathbf{C}^{(\ell)}\Big(\mathbf{D}^{(\ell)}\Big)^{-1}\mathbf{F}^{(\ell)}-\mathbf{A}^{(\ell)}\right]\mathbf{a}^{0}_{E\ell m}. \tag{3.26}$$

Αν θυμηθούμε τον ορισμό του πίνακα σκέδασης, οι παραπάνω σχέσεις ουσιαστικά δίνουν τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης για κάθε συχνότητα αφού συνδέουν τους σφαιρικούς συντελεστές ανάπτυξης των σκεδαζόμενων κυμάτων ανά συχνότητα σε σχέση με εκείνους του προσπίπτοντος. Πρέπει να τονίσουμε ότι η σφαιρική συμμετρία διατηρείται όπως ακριβώς στη στατική περίπτωση. Δηλαδή ο δυναμικός πίνακας σκέδασης $\mathbf{T}$, είναι ένας υπερπίνακας, ο οποίος συνδέει τους συντελεστές ανάπτυξης μεταξύ των διαφορετικών συχνοτήτων ω_n, με τον κάθε υποπίνακα (n, n′) να παραμένει διαγώνιος και ανεξάρτητος του m, δηλαδή

$$a^{+(n)}_{P\ell m} = \sum_{n'} T^{nn'}_{P\ell} a^{0(n')}_{P\ell m}. \tag{3.27}$$

3.3 Ενεργός Διατομή σκέδασης

Για τον υπολογισμό της (αδιάστατης) ενεργού διατομής σκέδασης, υπολογίζουμε τη μέση τιμή σε μια περίοδο της ταλάντωσης της ακτίνας και δίνεται από [39]

$$\sigma_{\rm sc} = \sum_{n=-N}^{N} \frac{2}{(k_n R_0)^2} \sum_{P\ell} (2\ell+1) |T^{n0}_{P\ell}|^2 \, , \tag{3.28}$$

όπου $k_n = \omega_n \sqrt{\epsilon\mu}/c$. Είναι πολύ σημαντικό να τονιστεί ότι στην πλήρως δυναμική μελέτη, η ενέργεια του Η/Μ πεδίου δεν διατηρείται, ακόμα και όταν τα υλικά δεν παρουσιάζουν απώλειες. Έτσι, μπορεί να εμφανιστεί απορρόφηση ή, ακόμα, και ενίσχυση του φωτός λόγω της ανταλλαγής ενέργειας μεταξύ του Η/Μ πεδίου και της ταλάντωσης της ακτίνας της σφαίρας. Η αντίστοιχη ενεργός διατομή απορρόφησης έχει την μορφή [39]

$$\sigma_{\rm abs} = -\sum_{n=-N}^{N} \frac{2}{(k_n R_0)^2} \sum_{P\ell} (2\ell+1) \{ |T^{n0}_{P\ell}|^2 + {\rm Re}[T^{n0}_{P\ell}] \delta_{n0} \}. \tag{3.29}$$

Η παραπάνω μελέτη μπορεί να εφαρμοστεί, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, για οποιαδήποτε περιοδική χρονικά μεταβολή της ακτίνας της σφαίρας. Μπορεί, λοιπόν να εφαρμοστεί και στην περίπτωση που οι ταλαντώσεις των σφαιρών παρουσιάζουν απόσβεση ή είναι παλμοί, αρκεί να θεωρηθούν ότι είναι επαναλαμβανόμενες διαδοχικές φθίνουσες ή παλμοί. Βέβαια, σε αυτήν την περίπτωση είναι απαραίτητο ο αριθμός των δεσμών που θα κρατήσουμε N να είναι αρκετά μεγαλύτερος, για λόγους που θα εξηγηθούν παρακάτω.

3.4 Αδιαβατική Προσέγγιση

Θα μελετήσουμε ταλαντώσεις της σφαίρας που είναι πολύ αργές σε σχέση με την συχνότητα του Η/Μ κύματος. Γι΄ αυτό το λόγο αξίζει να συγκρίνουμε τη δυναμική μέθοδο με την ημιστατική-αδιαβατική. Αυτή, περιγράφει τη δυναμική διαδικασία σαν μια σειρά στιγμιοτύπων της εξέλιξης της ταλάντωσης και θεωρεί χρονικά εξαρτώμενους συντελεστές $a^+_{P\ell m}(t)$ για το σκεδαζόμενο πεδίο, οι οποίοι προκύπτουν από ένα χρονικά εξαρτώμενο πίνακα σκέδασης $\mathbf{T}$, υποθέτοντας ότι είναι σταθεροί κατά τη διάρκεια μιας περιόδου του Η/Μ κύματος. Η κανονικοποιημένη ημιστατική ενεργός διατομή σκέδασης υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$\sigma_{\mathrm{sc;QS}}(t) = \frac{1}{(k_0 R_0)^2 |\mathbf{E}_0|^2} \sum_{P\ell m} |a^+_{P\ell m}(t)|^2. \tag{3.30}$$

Αφού το σκεδαζόμενο πεδίο είναι περιοδικό σε σχέση με γωνιακή συχνότητα Ω, η ενεργός διατομή σκέδασης μπορεί να αναπτυχθεί σε σειρά Fourier όπως περιγράφεται στο [42].

$$\sigma_{\mathrm{sc;QS}}(t) = \sum_{n=0,\pm1,\dots} \sigma^{(n)}_{\mathrm{sc;QS}} e^{in\Omega t}. \tag{3.31}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι η αδιαβατική προσέγγιση είναι έγκυρη στο όριο $\Omega/\omega \to 0$, όπως έχει αποδειχτεί στο [39] και θα συζητηθεί και σε επόμενο υποκεφάλαιο.

3.5 Σκέδαση από σφαίρα πυριτίου με χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα

3.5.1 Σύγκριση με αδιαβατική προσέγγιση

Μελετήσαμε την οπτική απόκριση μιας ομογενούς σφαίρας με ακτίνα R_0, με σχετική διηλεκτρική σταθερά $\epsilon_M = 12$, και σχετική μαγνητική διαπερατότητα $\mu_M = 1$, που αντιστοιχούν σε πυρίτιο, της οποίας η ακτίνα εκτελεί ημιτονοειδή ταλάντωση με γωνιακή συχνότητα Ω. Το σωματίδιο βρίσκεται σε αέρα και σε αυτό προσπίπτει επίπεδο Η/Μ κύμα συχνότητας ω. Θα εστιάσουμε στης πρώτης τάξης TE συντονισμό Mie της σφαίρας με στροφορμή $\ell = 12$ ($\mathrm{TE}_{\ell=12}$) στη συχνότητα $\omega_{\mathrm{r}} = 4.6422c/R_0$. Ο συντονισμός αυτός έχει πολύ υψηλό παράγοντα ποιότητας $Q = \omega_{\mathrm{r}}/2\gamma \approx 6.8 \times 10^8$, όπου γ είναι το ημιεύρος στο μισό του ύψους της κορυφής του συντονισμού (HWHM: Half width at half max), ενώ το αντίστοιχο προφίλ του ηλεκτρικού πεδίου στο συντονισμό φαίνεται στο Σχ. 3.1(α).

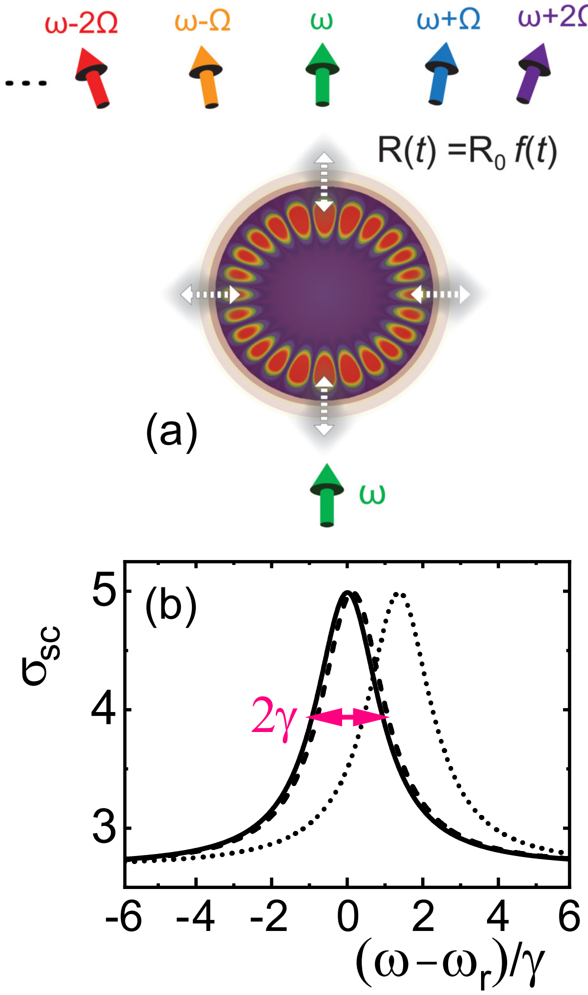
Η ενεργός διατομή σκέδασης κοντά στον παραπάνω συντονισμό για μια σφαίρα που δεν παρουσιάζει ταλάντωση στην ακτίνα (στατική περίπτωση) φαίνεται στο σχήμα 3.1(b) με συνεχή μαύρη γραμμή. Όταν η ακτίνα της σφαίρας ταλαντώνεται, αναμένουμε να εμφανιστούν ανελαστικές δέσμες σε συχνότητες ω_n, οι οποίες διαφέρουν από τη συχνότητα του προσπίπτοντος Η/Μ πεδίου κατά ακέραια πολλαπλάσια της συχνότητας ταλάντωσης Ω, κάτι το οποίο φαίνεται γραφικά στο Σχ. 3.1(a).

Στην ημιστατική προσέγγιση, μελετώνται διαδοχικά στιγμιότυπα της ταλάντωσης και το οπτικό φάσμα παρουσιάζει μετατόπιση που ακολουθεί τη μεταβολή της ακτίνας [33]. Στη περίπτωση του υπό μελέτη σκεδαστή, λόγω των ιδιοτήτων κλίμακας των εξισώσεων του Maxwell, αλλαγές στην ακτίνα της μορφής $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$ οδηγούν σε χρονικές μεταβολές της οπτικής συχνότητας συντονισμού σύμφωνα με τη σχέση

$$\omega_{\mathrm{r}}(t) = \omega_{\mathrm{r}} \frac{1}{1 + \eta \cos(\Omega t)} \approx \omega_{\mathrm{r}}[1 - \eta \cos(\Omega t)], \quad \text{για} \ \ \eta \ll 1 \ , \tag{3.32}$$

όπου $\eta = \frac{R_{max}}{R_0} - 1$ είναι το σχετικό πλάτος της ταλάντωσης της ακτίνας. Στο σχήμα 3.1(b) βλέπουμε τη μέγιστη μετατόπιση του οπτικού φάσματος της ενεργού διατομή σκέδασης για $\eta = 10^{-10}$ και $\eta = 10^{-9}$. Στη δεύτερη περίπτωση φαίνεται ότι η μετακίνηση του φάσματος ξεπερνά το HWHM, γ, και γι΄ αυτό το λόγο περιμένουμε η ενεργός διατομή σκέδασης να έχει πιο έντονες αλλαγές σε μια περίοδο ταλάντωσης της ακτίνας.

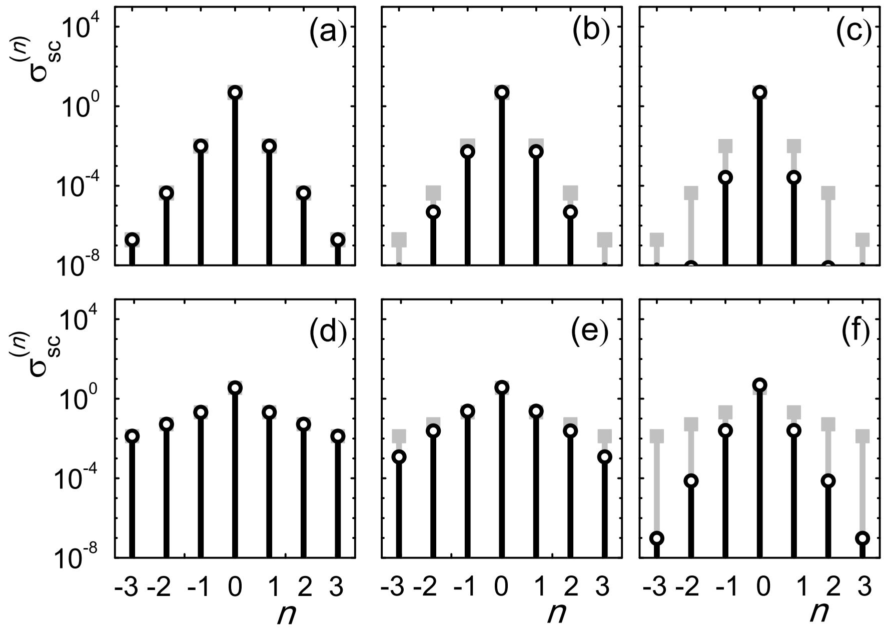
Στη συνέχεια μελετήσαμε τη δυναμική σφαίρα, της οποίας η ακτίνα ταλαντώνεται με ημιτονοειδή τρόπο, για διαφορετικές συχνότητες και πλάτη ταλάντωσης. Στο σχήμα 3.2 φαίνονται συγκριτικά οι συντελεστές Fourier της ενεργού διατομής σκέδασης, υπολογισμένοι με την ημιστατική και με τη δυναμική προσέγγιση. Η συχνότητα του εισερχόμενου Η/Μ κύματος διατηρείται σταθερή ακριβώς στην κορυφή του οπτικού συντονισμού ($\omega = \omega_{\mathrm{r}}$). Στο επάνω μέρος του σχήματος 3.2 φαίνονται τα αποτελέσματα για το μικρότερο πλάτος ταλάντωσης, $\eta = 10^{-10}$, και για συχνότητες ταλάντωσης $\Omega = \gamma/6$ [Σχ. 3.2(a)], $\Omega = \gamma$ [Σχ. 3.2(b)], και $\Omega = 6\gamma$ [Σχ. 3.2(c)]. Σε αυτή την περίπτωση φαίνεται ότι η αδιαβατική προσέγγιση υπερεκτιμά τη συνεισφορά των μεγαλύτερης τάξης ανελαστικών δεσμών και, μάλιστα, η απόκλιση αυξάνεται όσο μεγαλώνει η συχνότητα ταλάντωσης. Για μικρότερες



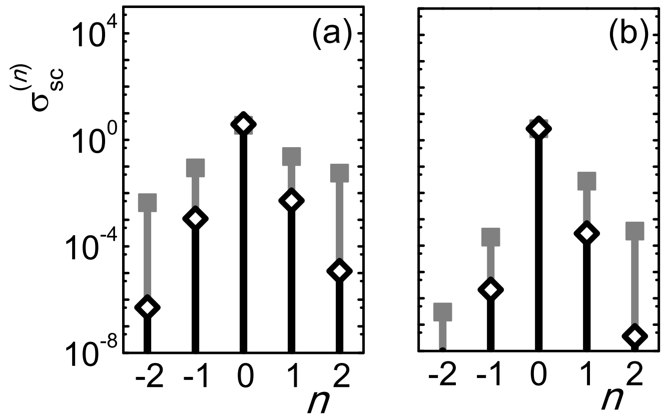
Σχήμα 3.1: (a) Γραφική αναπαράσταση του υπό μελέτη συστήματος. Μια σφαίρα πυριτίου έχει ακτίνα, η οποία ταλαντώνεται περιοδικά με το χρόνο, με εξίσωση $R(t) = R_0[1+\eta\cos(\Omega t)]$. Όταν γραμμικά πολωμένο μονοχρωματικό φως με γωνιακή συχνότητα ω προσπίπτει στο σωματίδιο, τότε το σκεδαζόμενο κύμα αποτελείται από δέσμες με συχνότητες $\omega, \omega\pm\Omega, \omega\pm 2\Omega, \ldots$. (b) Η ενεργός διατομή σκέδασης για στατική σφαίρα ακτίνας R_0, κοντά στο συντονισμό Mie πρώτης τάξης $\mathrm{TE}_{\ell=12}$ (μαύρη συνεχής γραμμή), ο οποίος έχει συχνότητα ω_r. Επιπλέον, φαίνεται και η ενεργός διατομή σκέδασης για ακτίνες, $R = R_0(1-\eta)$ με $\eta = 10^{-10}$ (διακεκομμένη γραμμή) και $\eta = 10^{-9}$ (εστιγμένη γραμμή). Στο (a) απεικονίζεται και το προφίλ της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, στη συχνότητα συντονισμού, στο επίπεδο που περνά από το κέντρο της σφαίρας και είναι κάθετο στην διεύθυνση πόλωσης του εισερχόμενου φωτός.

τιμές της Ω η διαφορά μεταξύ των δύο μεθόδων, είναι πολύ μικρότερη [39].

Για μεγαλύτερο πλάτος ταλάντωσης, $\eta = 10^{-9}$, η αλληλεπίδραση μεταξύ του Η/Μ κύματος και της ταλάντωσης της σφαίρας είναι ισχυρότερη, το οποίο υποδηλώνεται από τον πιο αργό ρυθμό μείωσης της τιμής της ενεργούς διατομής σκέδασης των ανελαστικών δεσμών, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2(d) έως (f). Όπως φαίνεται, όταν το προσπίπτον φως έχει συχνότητα ακριβώς επάνω στο συντονισμό υπάρχει συμμετρία μεταξύ των δεσμών μεγαλύτερης και μικρότερης ενέργειας (Stokes και anti-Stokes). Αυτό συμβαίνει λόγο της συμμετρίας του υπό μελέτη συντονισμού. Επιπλέον, όπως και αναμενόταν, η ημιστατική αδιαβατική προσέγγιση έχει ισχύ για μικρές συχνότητες ταλάντωσης της ακτίνας, ενώ για μεγαλύτερες υπερεκτιμά της συνεισφορά τον ανελαστικών δεσμών.



Σχήμα 3.2: Οι συντελεστές Fourier για τη ενεργό διατομή σκέδασης από μια σφαίρα πυριτίου που έχει χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα με εξίσωση $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$, όταν προσπίπτει σε αυτή φως με γωνιακή συχνότητα $\omega = \omega_{\mathrm{r}}$ (Σχ. 3.1). Τα αποτελέσματα από την αδιαβατική και την πλήρως δυναμική μελέτη απεικονίζονται με γκρι και μαύρα σύμβολα αντίστοιχα για: (a) $\Omega = \gamma/6$, $\eta = 10^{-10}$, (b) $\Omega = \gamma$, $\eta = 10^{-10}$, (c) $\Omega = 6\gamma$, $\eta = 10^{-10}$, (d) $\Omega = \gamma/6$, $\eta = 10^{-9}$, (e) $\Omega = \gamma$, $\eta = 10^{-9}$, και (f) $\Omega = 6\gamma$, $\eta = 10^{-9}$.



Σχήμα 3.3: Οι συντελεστές Fourier για τη ενεργό διατομή σκέδασης από μια σφαίρα πυριτίου που έχει χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα με εξίσωση $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$. (a) Αποτελέσματα για συχνότητα εισερχόμενου φωτός $\omega = \omega_\mathrm{r} + \gamma$ και συχνότητα ταλάντωσης της ακτίνας $\Omega = \gamma$. (b) Αποτελέσματα για $\omega = \omega_\mathrm{r} + 6\gamma$ και $\Omega = 6\gamma$.

Στη συνέχεια, μελετήθηκε η περίπτωση που το εισερχόμενο Η/Μ κύμα έχει συχνότητα, ω_r, κοντά σε αυτή του οπτικού συντονισμού, αλλά όχι ίση με αυτή. Μελετήθηκαν δύο περιπτώσεις, ώστε να εμφανίζονται τα φαινόμενα συντονισμού. Πρώτον, για συχνότητα ταλάντωσης $\Omega = \gamma$ και εισερχόμενου φωτός $\omega = \omega_\mathrm{r} + \gamma$ και, δεύτερον, για $\Omega = 6\gamma$ και $\omega = \omega_\mathrm{r} + 6\gamma$. Στα σχ. 3.3(a) και (b) φαίνονται οι συντελεστές Fourier που προκύπτουν από τον υπολογισμό της ενεργού διατομής σκέδασης με τη δυναμική μέθοδο Floquet, για δύο διαφορετικά πλάτη ταλάντωσης, $\eta = 10^{-10}$ και $\eta = 10^{-9}$.

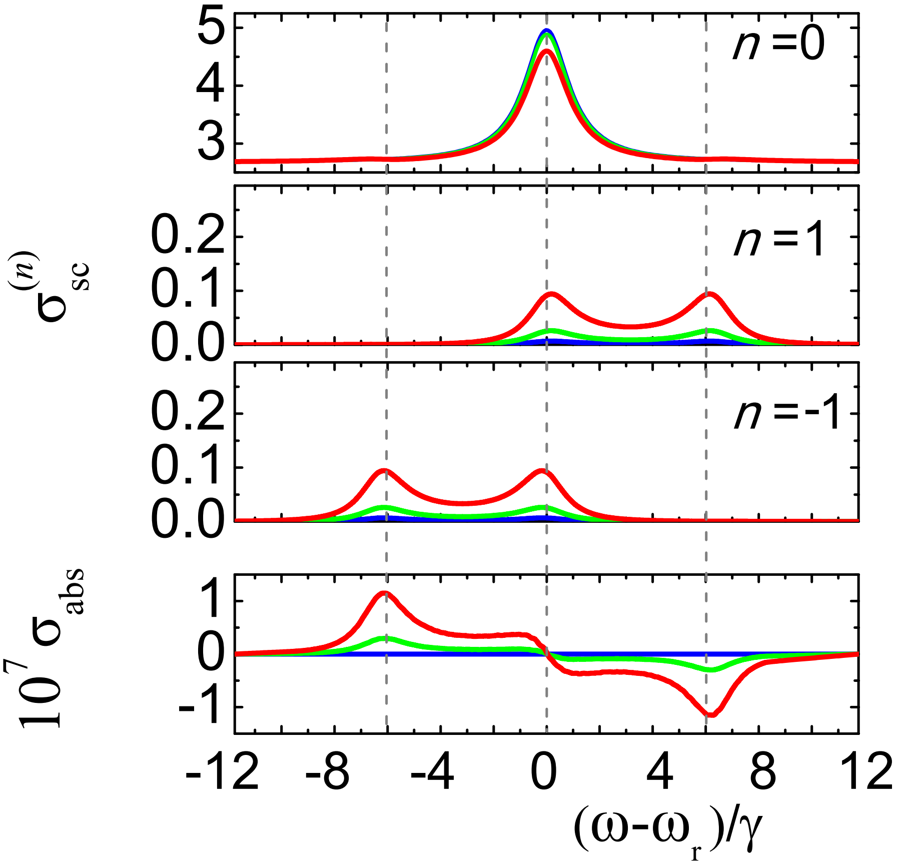
Σε τυπικά πειράματα BLS [43, 44, 45], η περιοχή $\Omega < \gamma$, που φαίνεται στο Σχ. 3.3(a), ονομάζεται μη διαχωρισμένης πλευρικής ζώνης [46, 47, 48], ενώ η περιοχή όπου $\Omega > \gamma$, η οποία φαίνεται στο Σχ. 3.3(b), ονομάζεται διαχωρισμένης πλευρικής ζώνης [49, 50, 51]. Η συνεισφορά των ανελαστικών δεσμών παρουσιάζει παρόμοια συμπεριφορά με εκείνη που είδαμε στην περίπτωση που η οπτική συχνότητα ήταν ακριβώς επάνω στο συντονισμό, η οποία συζητήθηκε παραπάνω. Σε αυτή την περίπτωση, όμως, εμφανίζεται ασυμμετρία μεταξύ των δεσμών Stokes και anti-Stokes όπως φαίνεται στα Σχ. 3.3(a) και (b). Στην περίπτωση της διαχωρισμένης πλευρικής ζώνης η ασυμμετρία είναι πιο έντονη, κάτι που σχετίζεται με την ασυμμετρία της μετατόπισης του φάσματος του SCS προς τα αριστερά και δεξιά κατά την ταλάντωση. Για συχνότητα πρόσπτωσης $\omega = \omega_\mathrm{r} - \Omega$, ο λόγος μεταξύ των δεσμών $n = 1$ και $n = -1$ αντιστρέφεται, που είναι συνέπεια της συμμετρίας του οπτικού συντονισμού κοντά στη ω_r. Στην παραπάνω περίπτωση συγκρίνοντας πάλι την αδιαβατική προσέγγιση με την δυναμική, καταλήγουμε στα ίδια συμπεράσματα με αυτά της περίπτωσης που το εισερχόμενο φως είχε οπτική συχνότητα ακριβώς στο συντονισμό και, επιπλέον, φαίνεται ότι στην ημιστατική προσέγγιση οι δέσμες είναι συμμετρικές.

3.5.2 Ισχυρή και ασθενής Αλληλεπίδραση

Στη συνέχεια κρατάμε σταθερή τη συχνότητα ταλάντωσης της ακτίνας της σφαίρας και μεταβάλλουμε τη συχνότητα του προσπίπτοντος Η/Μ κύματος. Στα Σχ. 3.4(a), (b), και (c) φαίνεται η μεταβολή του SCS της ελαστικής ($n = 0$) και των ανελαστικών ($n = \pm 1$) δεσμών, όταν η γωνιακή συχνότητα της ημιτονοειδούς ταλάντωσης της ακτίνας των σφαιρών είναι $\Omega = 6\gamma$. Η κάθε μία από τις τρεις καμπύλες, σε κάθε διάγραμμα, αντιστοιχεί σε διαφορετικές τιμές του πλάτους της μηχανικής ταλάντωσης και, συγκεκριμένα, για $\eta = 5 \times 10^{-10}$, $\eta = 10^{-9}$ και $\eta = 2 \times 10^{-9}$. Όταν $\Omega = 6\gamma$ βρισκόμαστε στην περιοχή ασθενούς αλληλεπίδρασης - περιοχή διαχωρισμένης ζώνης. Όσο αυξάνεται το πλάτος της ταλάντωσης, ενισχύεται η συνεισφορά της σκέδασης των ανελαστικών δεσμών πρώτης τάξης ($n = \pm 1$), και έχουμε την εμφάνιση μιας διπλής κορυφής με μέγιστα στα ω_r και $\omega_\mathrm{r} \mp \Omega$, λόγω της υψηλής αρχικής ή τελικής οπτικής πυκνότητάς καταστάσεων στην αντίστοιχη φωτονική μετάβαση. Επιπλέον, η ταλάντωση της ακτίνας, εκτός από τη δημιουργία των ανελαστικών δεσμών, οδηγεί στην εμφάνιση απορρόφησης ή ενίσχυσης της ενέργειας του Η/Μ πεδίου, κάτι που φαίνεται στην ενεργό διατομή απορρόφησης Εξ. (3.29) ή οποία απεικονίζεται στο Σχ. 3.4(d).

Όπως έχει συζητηθεί προηγουμένως [39], σε αντίθεση με την αδιαβατική προσέγγιση, η δυναμική περιγραφή λαμβάνει υπόψη την ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ των οπτικών και των μηχανικών (ταλάντωση ακτίνας) συντονισμών. Λόγω της συμμετρίας του οπτικού συντονισμού, η καμπύλη της απορρόφησης είναι αντισυμμετρική σε σχέση με το ω_r. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι η μεταφορά ενέργειας αυξάνεται όσο το πλάτος ταλάντωσης μεγαλώνει.

Όταν η συχνότητα ταλάντωσης είναι της τάξης του HWHM του οπτικού συντονισμού, γ, το σύστημα παρουσιάζει κάποια πολύ ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά. Αυτά φαίνονται στο Σχ. 3.6, όπου φαίνονται τα αποτελέσματα για την ελαστική και τις ανελαστικές δέσμες



Σχήμα 3.4: Από επάνω προς τα κάτω: Οι συντελεστές Fourier της ενεργού διατομής σκέδασης $\sigma_{\mathrm{sc}}^{(n)}$ για $n = 0, \pm 1$, και απορρόφησης, σ_{abs}, μιας σφαίρας πυριτίου με ακτίνα $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$, ταλαντούμενη με συχνότητα $\Omega = 6\gamma$, σε συνάρτηση με τη διαφορά συχνότητας $\omega - \omega_{\mathrm{r}}$, του εισερχόμενου φωτός σε σχέση με εκείνη του συντονισμού Mie $\mathrm{TE}_{\ell=12}$, για τρία διαφορετικά πλάτη ταλάντωσης της ακτίνας: $\eta = 5 \times 10^{-10}$ (μπλε γραμμή), $\eta = 10^{-9}$ (πράσινη γραμμή) και $\eta = 2 \times 10^{-9}$ (κόκκινη γραμμή).

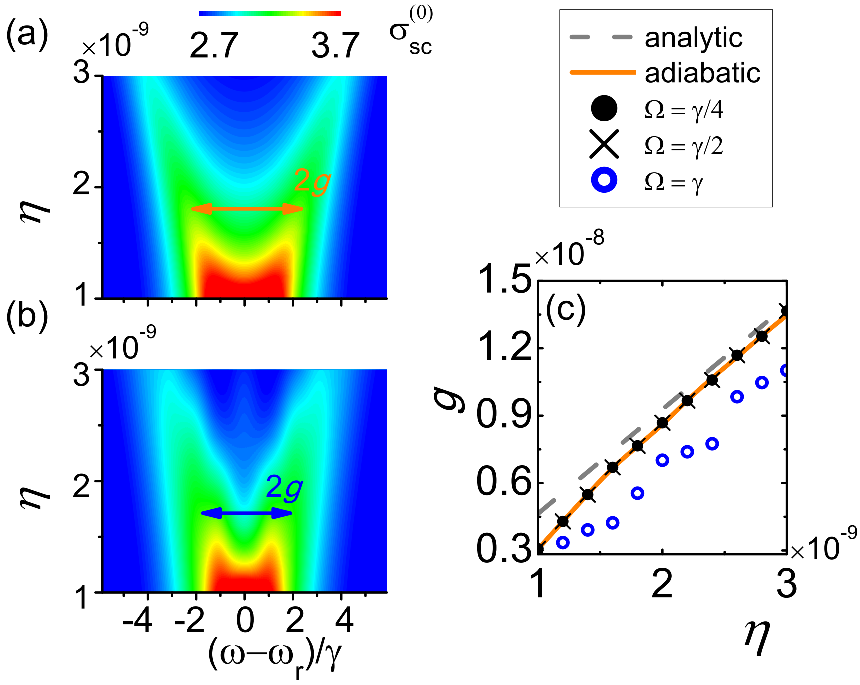
της ενεργού διατομής σκέδασης για $\Omega = \gamma$. Για μικρές τιμές του πλάτους ταλάντωσης ($\eta = 5 \times 10^{-10}$, μπλε), φαίνεται ότι υπάρχει μία κορυφή σε συχνότητα $\omega = \omega_{\mathrm{r}}$ για την ελαστική δέσμη, ενώ για τις ανελαστικές $n = 1$ ($n = -1$) εμφανίζεται μέγιστο σε συχνότητες λίγο μικρότερες από την $-\Omega$ (Ω). Αυτή είναι μια λίγο διαφορετική συμπεριφορά σε σχέση με εκείνη που περιγράφηκε στην περιοχή ασθενούς αλληλεπίδρασης. Αυξάνοντας το πλάτος ταλάντωσης ($\eta = 10^{-9}$, πράσινο), η ελαστική δέσμη μειώνεται, που συνοδεύεται από ταυτόχρονη αύξηση της ενεργούς διατομής σκέδασης των ανελαστικών δεσμών. Για ακόμα μεγαλύτερα πλάτη ταλάντωσης ($\eta = 2 \times 10^{-9}$, κόκκινο), παρατηρείται διαχωρισμός των κορυφών τόσο της ελαστικής, όσο και των ανελαστικών δεσμών. Αυτός ο διαχωρισμός είναι ένα χαρακτηριστικό που συμβαίνει όταν υπάρχει ισχυρή αλληλεπίδραση σε συστήματα με συζευγμένους ταλαντωτές [52, 53] και, επίσης, έχει παρατηρηθεί και σε οπτομηχανικά συστήματα, αλλά και σε περιπτώσεις σύζευξης Η/Μ ακτινοβολίας με άτομα και μόρια (Rabi splitting). Στη δική μας περίπτωση, ο διαχωρισμός συμβαίνει λόγω της παραμετρικής σύζευξης της μηχανικής ταλάντωσης με τον οπτικό συντονισμό, που έχουν πολύ διαφορετικές συχνότητες.

Το φαινόμενο του διαχωρισμού που αναφέρθηκε παραπάνω μπορεί να εξηγηθεί αν παρομοιαστεί με ένα μηχανικό ανάλογο, και συγκεκριμένα, με έναν εξαναγκασμένο ταλαντωτή με μετατόπιση x και με περιοδικά μεταβαλλόμενη ιδιοσυχνότητα $\omega_{\mathrm{r}}(t)$, που δίνεται από την εξίσωση (3.32). Για $\eta \ll 1$, έχουμε ${\omega_{\mathrm{r}}}^2(t) \approx \omega_{\mathrm{r}}^2[1 - 2\eta \cos(\Omega t)]$ και, σε απουσία εξωτερικής διέγερσης, μπορούμε να βρούμε τους κανονικούς τρόπους ταλάντωσης λύνοντας τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \omega_{\mathrm{r}}^2[1 - 2\eta \cos(\Omega t)]x(t) = 0\,. \tag{3.33}$$

Η εξίσωση (3.33) που αποκαλείται εξίσωση Mathieu [54], εμφανίστηκε περισσότερο από εκατό χρόνια πριν για την περιγραφή διάφορων εξαναγκασμένων μηχανικών ταλαντώσεων. Στη δικιά μας περίπτωση και συγκεκριμένα στο ημιστατικό αδιαβατικό όριο ($\Omega/\omega \to 0$), μπορούμε να βρούμε αναλυτικές λύσεις για την Εξ. (3.33) (βλέπε Παράρτημα Ε΄).

Οι κανονικοί τρόποι ταλάντωσης με τη μεγαλύτερη συνεισφορά στην ελαστική δέσμη ($n = 0$) είναι εκείνοι με το μεγαλύτερη απόσταση από το ω_{r}. Αν με ω_+ και ω_- συμβολίσουμε τις αντίστοιχες ιδιοσυχνότητες, παίρνουμε διαχωρισμό των κανονικών τρόπων ο οποίος



Σχήμα 3.5: (a) Ο συντελεστής Fourier που αντιστοιχεί στην ελαστική δέσμη ($n = 0$) της ενεργού διατομής σκέδασης μιας σφαίρας πυριτίου που αποτελείται από ταλαντούμενη ακτίνα, $R(t) = R_0[1+\eta\cos(\Omega t)]$, υπολογισμένη με την αδιαβατική-ημιστατική προσέγγιση σε σχέση με το πλάτος ταλάντωσης της ακτίνας και σε σχέση με τη διαφορά της συχνότητας, $\omega - \omega_{\mathrm{r}}$, του εισερχόμενου φωτός από τον πρώτης τάξης συντονισμό Mie $\mathrm{TE}_{\ell=12}$. (b) Το ίδιο με το (a) για $\Omega = \gamma$, υπολογισμένα με τη δυναμική μέθοδο. (c) Η εξάρτηση της παραμετρικής σταθεράς σύζευξης, g, σε σχέση με το πλάτος ταλάντωσης, για διαφορετικές συχνότητες ταλάντωσης Ω, η οποία υπολογίστηκε από την αφαίρεση των συχνοτήτων των δύο κορυφών της ενεργού διατομής σκέδασης της ελαστικής δέσμης. Οι κλειστοί κύκλοι, τα σύμβολα $\times$ και οι ανοικτοί κύκλοι αντιστοιχούν σε υπολογισμούς που έγιναν με την πλήρως δυναμική μελέτη για συχνότητες ταλάντωσης $\Omega = \gamma/4$, $\Omega = \gamma/2$, και $\Omega = \gamma$ [από το (b)], αντίστοιχα. Η διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στην Εξ. (3.34), ενώ η πορτοκαλί γραμμή λήφθηκε από το αδιαβατικό φάσμα του (a).

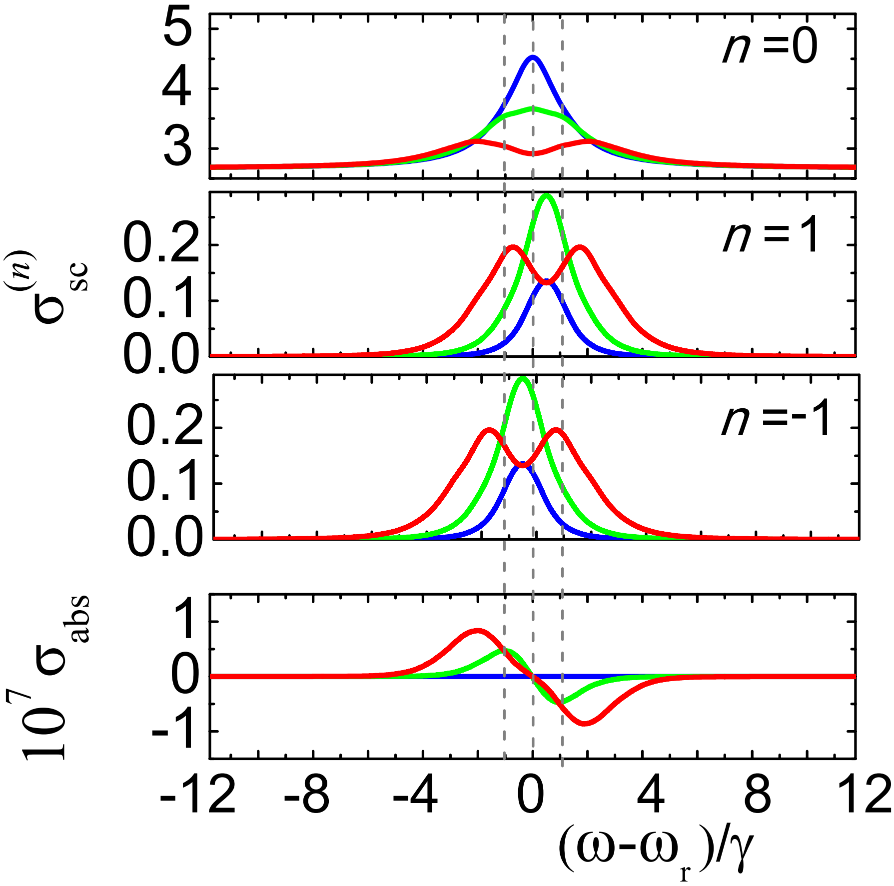
μεταβάλλεται γραμμικά με το η, ακολουθώντας την Εξ. (Ε΄.5)

$$\omega_+ - \omega_- \equiv 2g \simeq 2\eta\omega_{\rm r}, \tag{3.34}$$

όπου g ορίζεται η παραμετρική σταθερά σύζευξης.

Πραγματοποιήσαμε υπολογισμούς στο πλαίσιο της αδιαβατικής ημιστατικής προσέγγισης. όπως περιγράφτηκε στην ενότητα 3.4. Στο Σχ. 3.5(α) φαίνεται το φάσμα της ενεργούς διατομής σκέδασης της ελαστικής δέσμης $\sigma_{\rm sc}^{(0)}$ για διαφορετικά πλάτη ταλάντωσης, η, όπως υπολογίστηκαν με την αδιαβατική προσέγγιση και έχει σημειωθεί ο διαχωρισμός $2g$, ο οποίος αυξάνεται όσο μεγαλώνει το η. Με αυτόν τον τρόπο, υπολογίστηκαν οι τιμές του g για κάθε πλάτος ταλάντωσης και, έτσι, απεικονίζονται στο σχ. 3.5(c) με πορτοκαλί γραμμές, ενώ η αναλυτική έκφραση (3.34) αντιστοιχεί στη διακεκομμένη γκρι γραμμή. Οι δύο γραμμές έχουν καλή συμφωνία, κάτι που αποδεικνύει ότι το μηχανικό ανάλογο μπορεί να δώσει μια ικανοποιητική περιγραφή της συμπεριφοράς του υπό μελέτη συστήματος. Για σύγκριση, στο σχήμα υπάρχουν και τα αντίστοιχα αποτελέσματα από τη δυναμική προσέγγιση για πολύ μικρές τιμές του Ω, και συγκεκριμένα για $\Omega = \gamma/4$ και $\Omega = \gamma/2$. Όπως φαίνεται υπάρχει συμφωνία και σε αυτούς τους υπολογισμούς.

Στη συνέχεια μελετάμε την περίπτωση που το Ω είναι μεγαλύτερο και, πλέον, δεν είμαστε στο όριο της αδιαβατικής προσέγγισης. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήσαμε $\Omega = \gamma$, το οποίο είναι και εκείνο που χρησιμοποιήσαμε για το Σχ. 3.3. Στο σχήμα 3.6(a), φαίνεται το $\sigma_{\rm sc}^{(0)}$ για διαφορετικές τιμές του η. Το Σχ. 3.6(b) είναι μια πιο λεπτομερής εκδοχή του Σχ. 3.3(a). Για πολύ μικρές τιμές του η η κορυφή είναι μονή, η οποία διαχωρίζεται για $\eta = 1.2 \times 10^{-9}$ με $\eta = 1.4 \times 10^{-9}$. Ο διαχωρισμός, $2g$, απεικονίζεται στο Σχ. 3.5(c) με ανοικτά σύμβολα. Παρατηρούμε ότι για μεγαλύτερες τιμές του η, το φάσμα γίνεται περίπλοκο και εμφανίζονται περισσότερες κορυφές. Σε αυτήν την περιοχή, για μεγαλύτερα Ω, η απλή αναλυτική προσέγγιση που έγινε για τον υπολογισμό της παραμέτρου σύζευξης g, πλέον, δεν είναι έγκυρη και πρέπει να πραγματοποιηθούν αναλυτικοί δυναμικοί υπολογισμοί.



Σχήμα 3.6: Από επάνω προς τα κάτω: Οι συντελεστές Fourier της ενεργού διατομής σκέδασης $\sigma_{\mathrm{sc}}^{(n)}$ για $n = 0, \pm 1$, και απορρόφησης, σ_{abs}, μιας σφαίρας πυριτίου με ακτίνα $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$, ταλαντούμενη με συχνότητα $\Omega = \gamma$ σε συνάρτηση με τη διαφορά συχνότητας $\omega - \omega_{\mathrm{r}}$, του εισερχόμενου φωτός σε σχέση με εκείνη του συντονισμού Mie $\mathrm{TE}_{\ell=12}$, για τρία διαφορετικά πλάτη ταλάντωσης της ακτίνας: $\eta = 5 \times 10^{-10}$ (μπλε γραμμή), $\eta = 10^{-9}$ (πράσινη γραμμή) και $\eta = 2 \times 10^{-9}$ (κόκκινη γραμμή).

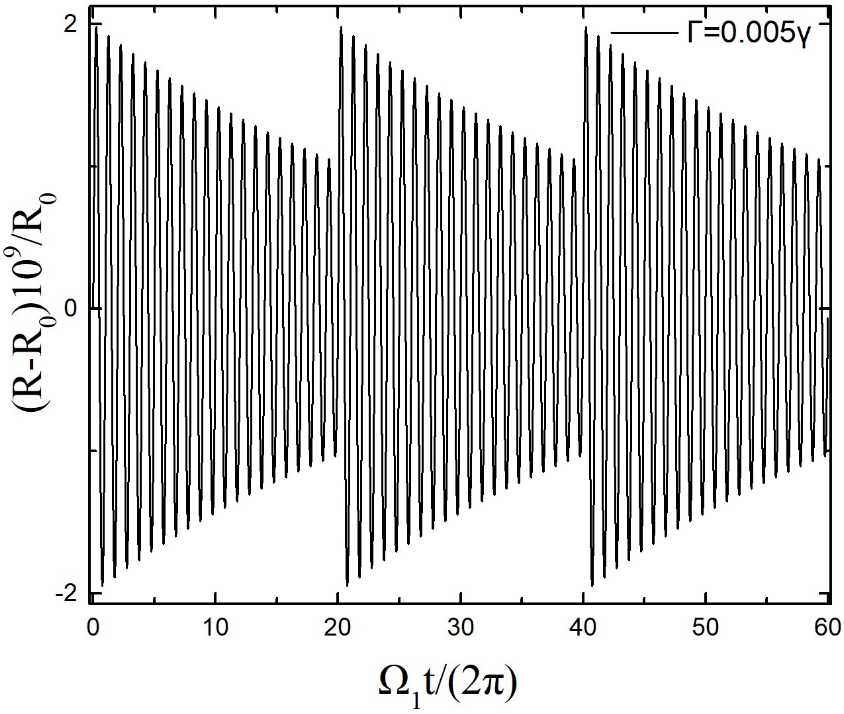
3.5.3 Περιοδικά φθίνουσες ταλαντώσεις της ακτίνας

Σε πραγματικές συνθήκες, οι απώλειες στους οπτικούς ή μηχανικούς ταλαντωτές δεν μπορούν να αποφευχθούν και αυτό επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα ειδικά στις περιπτώσεις συντονισμών υψηλής ποιότητας. Οι οπτικοί συντονισμοί είναι αναμενόμενο να φαρδύνουν στην περίπτωση που υπάρχουν οπτικές απώλειες. Επειδή, η επιρροή αυτών είναι προβλέψιμη, έχει περισσότερο ενδιαφέρον να επικεντρωθούμε στην περίπτωση που υπάρχουν απώλειες στη μηχανική ταλάντωση της ακτίνας της σφαίρας. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η δυναμική προσέγγιση που αναπτύξαμε είναι έγκυρη μόνο στην περίπτωση που η ταλάντωση της ακτίνας είναι περιοδική. Ένας τρόπος, λοιπόν, για να μελετηθεί η περίπτωση της φθίνουσας ταλάντωσης, είναι, αυτή, να θεωρηθεί ως μια συνεχής σειρά από διαδοχικές φθίνουσες ταλαντώσεις που έχουν μια επαρκώς μεγάλη περίοδο επανάληψης $\tau >> T$. Θεωρούμε, λοιπόν, ένα τέτοιο "τρένο" παλμών από φθίνουσες ταλαντώσεις με συχνότητα Ω και ρυθμό απόσβεσης Γ, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.7 και έχει τη μορφή

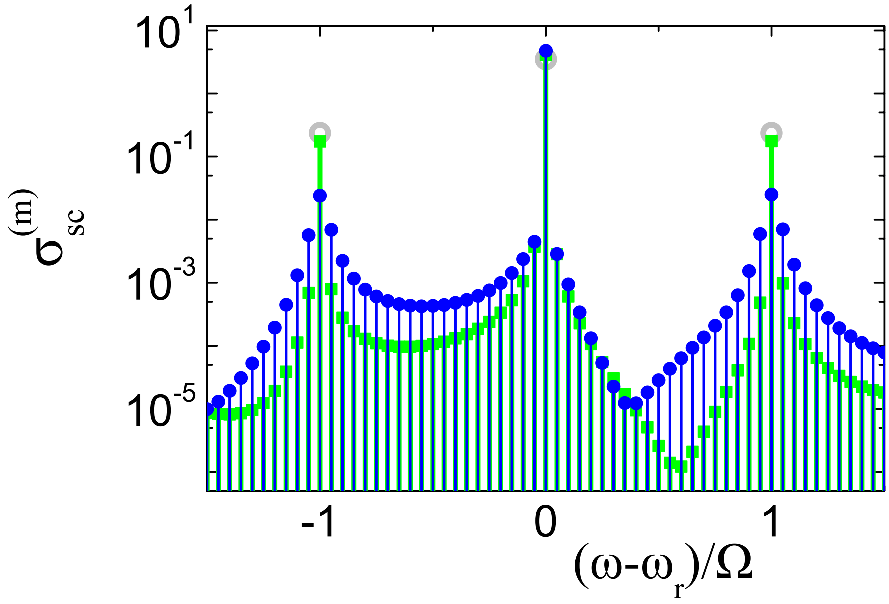
$$R(t) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \Pi(t-p\tau) R_0 [1 + \eta e^{-\Gamma(t-p\tau)} \cos\left(\Omega(t-p\tau)\right)] \ , \tag{3.35}$$

όπου $\Pi(t) = 1$ για $0 < t < \tau$, αλλιώς είναι 0. Η περίοδος τ είναι ανεξάρτητη της συχνότητας Ω και ελέγχει μόνο τη διαμεροποίηση στις συχνότητες των ελαστικών δεσμών. Στο Σχ. 3.8 φαίνονται οι δέσμες από την ενεργό διατομή σκέδασης της ταλαντούμενης σφαίρας για ένα μικρό συντελεστή απόσβεσης $\Gamma = 0.033\gamma$. Όσο το Γ αυξάνεται, η συνεισφορά των δεσμών ($n = \pm 1$, στο Σχ. 3.2) μικραίνει, ενώ των συχνοτήτων γύρω από τις Ω αυξάνεται. Συγκεκριμένα, η ενεργός διατομή σκέδασης για την ελαστική δέσμη, $\sigma_{\mathrm{sc}}^{(0)}$, αυξάνεται κατά περίπου 12%, για $\Gamma = 0.033\gamma$, και 30% για $\Gamma = 0.2\gamma$, σε σύγκριση με την περίπτωση αμείωτης ταλάντωσης, ενώ για την ενεργό διατομή σκέδασης για τις ανελαστικές δέσμες παρατηρείται μείωση κατά περίπου 26% για $\Gamma = 0.033\gamma$ και σχεδόν 90% για $\Gamma = 0.2\gamma$.

Στη συνέχεια εξετάσαμε την επιρροή της μηχανικής απόσβεσης στα αποτελέσματα που συζητήθηκαν στο Σχ. 3.5(b). Στο Σχ. 3.9(a) φαίνεται το αντίστοιχο $\sigma_{\mathrm{sc}}^{(0)}$ φάσμα, για την ίδια συχνότητα ταλάντωσης $\Omega = \gamma$, με ρυθμό απόσβεσης $\Gamma = 0.033\gamma$, για αρχικά πλάτη ταλάντωσης μεταξύ $\eta = 10^{-9}$ και $\eta = 4 \times 10^{-9}$. Φαίνεται ότι, η εμφάνιση απωλειών στη μηχανική ταλάντωση επιβραδύνει την εμφάνιση του διαχωρισμού της κορυφής που, όπως αναφέρθηκε, είναι χαρακτηριστικό της ισχυρής αλληλεπίδρασης, και, τώρα, συμβαίνει σε μεγαλύτερα



Σχήμα 3.7: Για να μελετηθεί η περίπτωση της φθίνουσας ταλάντωσης θεωρήσαμε την ταλάντωση της ακτίνας ως μια συνεχή σειρά από διαδοχικές φθίνουσες ταλαντώσεις που έχουν μια επαρκώς μεγάλη περίοδο επανάληψης $\tau >> T$. Στο σχήμα φαίνεται το "τρένο" παλμών από φθίνουσες ταλαντώσεις με συχνότητα $\Omega = \Omega_1 = \gamma$, ρυθμό απόσβεσης $\Gamma = 0.005\gamma$ και $\tau = 20T$.



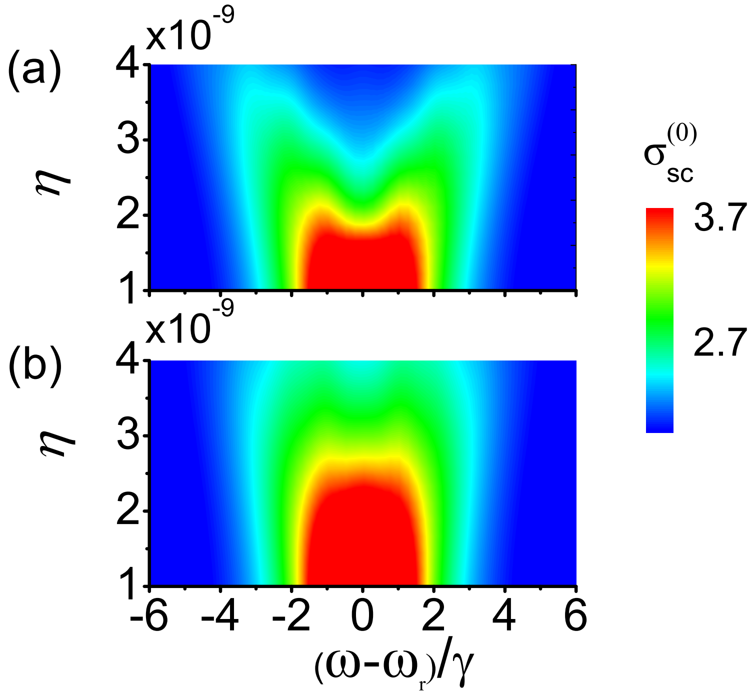
Σχήμα 3.8: Οι συντελεστές Fourier της ενεργού διατομής σκέδασης μιας σφαίρας πυριτίου, που αποτελείται από ταλαντούμενη ακτίνα, $R(t) = R_0[1 + \eta \cos(\Omega t)]$, συχνότητα και πλάτος ταλάντωσης $\Omega = \gamma$ και $\eta = 10^{-9}$, αντίστοιχα, για δύο διαφορετικούς συντελεστές απόσβεσης $\Gamma = 0.033\gamma$ (πράσινα τετράγωνα) και $\Gamma = 0.2\gamma$ (μπλε κύκλοι). Το εισερχόμενο φως έχει συχνότητα ίση με του συντονισμού, $\omega = \omega_{\rm r}$ (Σχ. 3.1). Οι φθίνουσες ταλαντώσεις έχουν περίοδο $\tau = 20T$, η οποία δημιουργεί ένα πυκνό φάσμα δεσμών Fourier. Τα γκρι σύμβολα απεικονίζουν την ενεργό διατομή σκέδασης των δεσμών στην περίπτωση που η ταλάντωση είναι αμείωτη [απεικονίζεται και στο Σχ. 3.2(c).]

πλάτη ταλάντωσης, η, ενώ τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά του φάσματος εξασθενούν. Τα παραπάνω, γίνονται περισσότερο εμφανή στην περίπτωση που αυξήσουμε το ρυθμό απόσβεσης σε $\Gamma = 0.066\gamma$, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.9(b). Γενικά, όπως φάνηκε, ο διαχωρισμός της κορυφής στην περιοχή ισχυρής σύζευξης μπορεί να εξαφανιστεί με την παρουσία μηχανικής απόσβεσης, αλλά είναι δυνατό να εμφανιστεί ξανά, αν αυξηθεί το πλάτος ταλάντωσης.

Στην περίπτωση που υπάρχει οπτική απορρόφηση, τα αποτελέσματα είναι παρόμοια. Αν, για παράδειγμα, θεωρήσουμε ότι η διηλεκτρική σταθερά έχει ένα φανταστικό μέρος $\mathrm{Im}\{\epsilon\} = 10^{-4}$, το απαιτούμενο πλάτος, η, για να επιτευχθεί ο διαχωρισμός στην περίπτωση της ισχυρής σύζευξης, αυξάνεται σχεδόν κατά δύο τάξεις μεγέθους. Τέλος, είναι δυνατό να ληφθεί υπόψη και η διασπορά στις συχνότητες, όπως γίνεται στις αναφορές [40, 41], αλλά αυτό δεν αποτέλεσε κομμάτι μελέτης της παρούσας διατριβής.

Τα αποτελέσματα που περιγράφηκαν παραπάνω ισχύουν και για άλλους οπτικούς συντονισμούς, για διαφορετικά ℓ, με κάποιες διαφορές. Γενικά, για χαμηλότερα ℓ, οι συντονισμοί έχουν χαμηλότερο δείκτη ποιότητας, κάτι που σημαίνει ότι είναι λιγότερο ευαίσθητοι και απαιτούνται μεγαλύτερα πλάτη ταλάντωσης, η, για να επιτευχθούν παρόμοια αποτελέσματα. Επίσης, η ευαισθησία αυξάνεται για συντονισμούς στους οποίους το Η/Μ πεδίο εντοπίζεται κοντά στην επιφάνεια της σφαίρας, γιατί έτσι επιτυγχάνεται καλύτερη αλληλεπίδραση με την ταλάντωση της ακτίνας. Για τους δύο παραπάνω λόγους επιλέχθηκε ο συντονισμός για $\ell = 12$, αφού έχει πολύ υψηλό συντελεστή ποιότητας και, ταυτόχρονα, το Η/Μ πεδίο είναι συγκεντρωμένο κοντά στην επιφάνεια της σφαίρας, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.1(a). Εκτός από την εξάρτηση του οπτικού συντελεστή σύζευξης, g, από τα χαρακτηριστικά του οπτικού συντονισμού, δε βρέθηκε κάποια διαφορά μεταξύ των συντονισμών τύπου TE και TH.

Τα αποτελέσματα που συζητήθηκαν μπορούν να εμφανιστούν σε διαφορετικές περιοχές μεγεθών. Η συχνότητα ταλάντωσης που απαιτείται εξαρτάται από το δείκτη ποιότητας της κορυφής. Για το ορατό και το υπέρυθρο, η συχνότητα της ταλάντωσης μπορεί να είναι από μερικά MHz έως GHz για σφαίρα της τάξης ενός μικρού, κάτι το οποίο μπορεί να επιτευχθεί πειραματικά [21, 55, 56]. Για παράδειγμα, για μια σφαίρα ακτίνας $R_0 = 1\ \mu m$, η οπτική συχνότητα είναι $\omega_r \simeq 2\pi \times 222$ THz και το αντίστοιχο HWHM $\gamma \simeq 1$ MHz, άρα και συχνότητες ταλάντωσης είναι της τάξης των MHz.



Σχήμα 3.9: Ο συντελεστής Fourier, που αντιστοιχεί στην ελαστική δέσμη ($n = 0$), της ενεργού διατομής σκέδασης σφαίρας πυριτίου, της οποίας η ακτίνα εκτελεί φθίνουσες ταλαντώσεις συχνότητας $\Omega = \gamma$ και ρυθμού μείωσης: (a) $\Gamma = 0.033\gamma$ και (b) $\Gamma = 0.066\gamma$, σε συνάρτηση με το πλάτος ταλάντωσης, η, και με τη διαφορά της συχνότητας, $\omega - \omega_{\mathrm{r}}$, του εισερχόμενου φωτός από τον πρώτης τάξης συντονισμό Mie $\mathrm{TE}_{\ell=12}$.

3.6 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάσαμε μια επέκταση της θεωρίας Mie που περιγράφει τη σκέδαση από ένα σφαιρικό σκεδαστή με περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη ακτίνα, εφαρμόζοντας τη δυναμική μέθοδο Floquet. Η μελέτη έγινε σε συντονισμούς Mie υψηλής ποιότητας-Q, και υπολογίστηκαν τα φάσματα της ελαστικής και της ανελαστικής ενεργούς σκέδασης, σε συνδυασμό με την αδιαβατική προσέγγιση, με σκοπό την ανάδειξη της φυσικής σημασίας των φαινομένων.

Στην περιοχή ασθενούς αλληλεπίδρασης, η θεωρία διαταραχών προβλέπει ισχυρή ανελαστική σκέδαση για συχνότητες που έχουν υψηλή πυκνότητα καταστάσεων. Γι΄ αυτόν το λόγο, αν το προσπίπτον κύμα έχει συχνότητα λίγο μικρότερη ή λίγο μεγαλύτερη από τον οπτικό συντονισμό, ευνοούνται οι δέσμες anti-Stokes ή Stokes, αντίστοιχα, κάτι που φαίνεται και από την ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ του σφαιρικού ταλαντωτή και του ΗΜ πεδίου. Το φαινόμενο αυτό, δεν μπορεί να προβλεφθεί από την αδιαβατική προσέγγιση, ειδικά στις περιπτώσεις που το πλάτος ταλάντωσης της ακτίνας είναι μεγάλο και οι ανελαστικές δέσμες υψηλότερης τάξης γίνονται σημαντικές.

Στην περιοχή υψηλής σύζευξης, εμφανίστηκαν φαινόμενα που οφείλονται σε αλληλεπίδραση παραμετρικής φύσεως, τα οποία, αν αυξήσουμε το πλάτος ταλάντωσης, οδηγούν σε διαχωρισμό της κορυφής τόσο της ελαστικής δέσμης όσο και των ανελαστικών, κάτι που προβλέπεται και από τις λύσεις των εξισώσεων του Mathieu στο κατάλληλο όριο. Τέλος, δείξαμε ότι η προσθήκη απόσβεσης στην ταλάντωση της ακτίνας της σφαίρας προκαλεί μείωση στα φαινόμενα ανελαστικής σκέδασης και ταυτόχρονα εξασθενεί το διαχωρισμό λόγω του παραμετρικού συντονισμού.

Βιβλιογραφία

[1] Nader Engheta. Metamaterials with high degrees of freedom: space, time, and more. *Nanophotonics*, 10(1):639–642, 2021.

[2] Frederic R Morgenthaler. Velocity modulation of electromagnetic waves. *IRE Transactions on microwave theory and techniques*, 6(2):167–172, 1958.

[3] A Oliner and Alexander Hessel. Guided waves on sinusoidally-modulated reactance surfaces. *IRE Transactions on Antennas and Propagation*, 7(5):201–208, 1959.

[4] J-C Simon. Action of a progressive disturbance on a guided electromagnetic wave. *IRE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 8(1):18–29, 1960.

[5] D Holberg and K Kunz. Parametric properties of fields in a slab of time-varying permittivity. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(2):183–194, 1966.

[6] FADYA Harfoush and Allen Taflove. Scattering of electromagnetic waves by a material half-space with a time-varying conductivity. *IEEE transactions on antennas and propagation*, 39(7):898–906, 1991.

[7] Jorge R Zurita-Sánchez, P Halevi, and Juan C Cervantes-Gonzalez. Reflection and transmission of a wave incident on a slab with a time-periodic dielectric function (t). *Physical Review A*, 79(5):053821, 2009.

[8] Mikael C Rechtsman, Julia M Zeuner, Yonatan Plotnik, Yaakov Lumer, Daniel Podolsky, Felix Dreisow, Stefan Nolte, Mordechai Segev, and Alexander Szameit. Photonic floquet topological insulators. *Nature*, 496(7444):196–200, 2013.

[9] Eran Lustig, Yonatan Sharabi, and Mordechai Segev. Topological aspects of photonic time crystals. *Optica*, 5(11):1390–1395, 2018.

[10] Neng Wang, Zhao-Qing Zhang, and Che Ting Chan. Photonic floquet media with a complex time-periodic permittivity. *Physical Review B*, 98(8):085142, 2018.

[11] Qingqing Cheng, Yiming Pan, Huaiqiang Wang, Chaoshi Zhang, Dong Yu, Avi Gover, Haijun Zhang, Tao Li, Lei Zhou, and Shining Zhu. Observation of anomalous π modes in photonic floquet engineering. *Physical Review Letters*, 122(17):173901, 2019.

[12] Theodoros T Koutserimpas and Romain Fleury. Electromagnetic fields in a time-varying medium: exceptional points and operator symmetries. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 68(9):6717–6724, 2020.

[13] Bing Wang, Jiaqi Quan, Jianfei Han, Xiaopeng Shen, Hongwei Wu, and Yiming Pan. Photonic floquet time crystals. *arXiv preprint arXiv:2012.08217*, 2020.

[14] Tobias J Kippenberg and Kerry J Vahala. Cavity optomechanics: back-action at the mesoscale. *science*, 321(5893):1172–1176, 2008.

[15] Markus Aspelmeyer, Tobias J Kippenberg, and Florian Marquardt. Cavity optomechanics. *Reviews of Modern Physics*, 86(4):1391, 2014.

[16] Yu-long Liu, Chong Wang, Jing Zhang, and Yu-xi Liu. Cavity optomechanics: Manipulating photons and phonons towards the single-photon strong coupling. *Chinese Physics B*, 27(2):024204, 2018.

[17] Silvia Viola Kusminskiy, Hong X Tang, and Florian Marquardt. Coupled spin-light dynamics in cavity optomagnonics. *Physical Review A*, 94(3):033821, 2016.

[18] T. Liu, X. Zhang, H. X. Tang, and M. E. Flatté. Optomagnonics in magnetic solids. *Phys. Rev. B*, 94:060405, 2016.

[19] Dany Lachance-Quirion, Yutaka Tabuchi, Arnaud Gloppe, Koji Usami, and Yasunobu Nakamura. Hybrid quantum systems based on magnonics. *Applied Physics Express*, 12(7):070101, 2019.

[20] Evangelos Almpanis. *Optomagnonic Structures: Novel Architectures for Simultaneous Control of Light and Spin Waves*. World Scientific, 2021.

[21] Xufeng Zhang, Chang-Ling Zou, Liang Jiang, and Hong X Tang. Cavity magnomechanics. *Science advances*, 2(3):e1501286, 2016.

[22] CA Regal and KW Lehnert. From cavity electromechanics to cavity optomechanics. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 264, page 012025. IOP Publishing, 2011.

[23] Changchun Zhong, Xu Han, Hong X Tang, and Liang Jiang. Entanglement of microwave-optical modes in a strongly coupled electro-optomechanical system. *Physical Review A*, 101(3):032345, 2020.

[24] Young-Shin Park and Hailin Wang. Resolved-sideband and cryogenic cooling of an optomechanical resonator. *Nature physics*, 5(7):489–493, 2009.

[25] Matthew Tomes and Tal Carmon. Photonic micro-electromechanical systems vibrating at x-band (11-ghz) rates. *Physical Review Letters*, 102(11):113601, 2009.

[26] AB Matsko, AA Savchenkov, VS Ilchenko, D Seidel, and L Maleki. Optomechanics with surface-acoustic-wave whispering-gallery modes. *Physical Review Letters*, 103(25):257403, 2009.

[27] Gaurav Bahl, Matthew Tomes, Florian Marquardt, and Tal Carmon. Observation of spontaneous brillouin cooling. *Nature Physics*, 8(3):203–207, 2012.

[28] Yan-Lei Zhang, Chun-Hua Dong, Chang-Ling Zou, Xu-Bo Zou, Ying-Dan Wang, and Guang-Can Guo. Optomechanical devices based on traveling-wave microresonators. *Physical Review A*, 95(4):043815, 2017.

[29] JA Haigh, Andreas Nunnenkamp, AJ Ramsay, and AJ Ferguson. Triple-resonant brillouin light scattering in magneto-optical cavities. *Physical Review Letters*, 117(13):133602, 2016.

[30] Xufeng Zhang, Na Zhu, Chang-Ling Zou, and Hong X Tang. Optomagnonic whispering gallery microresonators. *Physical Review Letters*, 117(12):123605, 2016.

[31] A Osada, R Hisatomi, A Noguchi, Y Tabuchi, R Yamazaki, K Usami, M Sadgrove, R Yalla, M Nomura, and Y Nakamura. Cavity optomagnonics with spin-orbit coupled photons. *Physical review letters*, 116(22):223601, 2016.

[32] Sanchar Sharma, Yaroslav M Blanter, and Gerrit EW Bauer. Light scattering by magnons in whispering gallery mode cavities. *Physical Review B*, 96(9):094412, 2017.

[33] G Gantzounis, N Papanikolaou, and N Stefanou. Nonlinear interactions between high-q optical and acoustic modes in dielectric particles. *Physical Review B*, 84(10):104303, 2011.

[34] TS Monteiro, J Millen, GAT Pender, Florian Marquardt, D Chang, and PF Barker. Dynamics of levitated nanospheres: towards the strong coupling regime. *New Journal of Physics*, 15(1):015001, 2013.

[35] Andrés de los Ríos Sommer, Nadine Meyer, and Romain Quidant. Strong optomechanical coupling at room temperature by coherent scattering. *Nature Communications*, 12(1):1–7, 2021.

[36] E Almpanis, GP Zouros, PA Pantazopoulos, KL Tsakmakidis, N Papanikolaou, and N Stefanou. Spherical optomagnonic microresonators: triple-resonant photon transitions between zeeman-split mie modes. *Physical Review B*, 101(5):054412, 2020.

[37] DW Wright and RSC Cobbold. Two-dimensional phononic crystals with time-varying properties: a multiple scattering analysis. *Smart Materials and Structures*, 19(4):045006, 2010.

[38] Romain Fleury, Dimitrios L Sounas, and Andrea Alù. Subwavelength ultrasonic circulator based on spatiotemporal modulation. *Physical Review B*, 91(17):174306, 2015.

[39] Ioannis Stefanou, Petros Andreas Pantazopoulos, and Nikolaos Stefanou. Light scattering by a spherical particle with a time-periodic refractive index. *JOSA B*, 38(2):407–414, 2021.

[40] G Ptitcyn, A Lamprianidis, T Karamanos, M Müller, R Alaee, VS Asadchy, MS Mirmoosa, M Albooyeh, S Fan, C Rockstuhl, et al. Scattering of light by spheres made from a time-modulated and dispersive material. In *2021 Fifteenth International Congress on Artificial Materials for Novel Wave Phenomena (Metamaterials)*, pages 347–349. IEEE, 2021.

[41] Kurt Schab, Bradley Shirley, and KC Kerby-Patel. Scattering properties of spherical time-varying conductive shells. *arXiv preprint arXiv:2105.00058*, 2021.

[42] Evangelos Almpanis, Nikolaos Papanikolaou, and Nikolaos Stefanou. Breakdown of the linear acousto-optic interaction regime in phoxonic cavities. *Optics express*, 22(26):31595–31607, 2014.

[43] Yuxiang Liu, Marcelo Davanço, Vladimir Aksyuk, and Kartik Srinivasan. Electromagnetically induced transparency and wideband wavelength conversion in silicon nitride microdisk optomechanical resonators. *Physical Review Letters*, 110(22):223603, 2013.

[44] Teemu Ojanen and Kjetil Børkje. Ground-state cooling of mechanical motion in the unresolved sideband regime by use of optomechanically induced transparency. *Physical Review A*, 90(1):013824, 2014.

[45] JunHwan Kim, Mark C Kuzyk, Kewen Han, Hailin Wang, and Gaurav Bahl. Nonreciprocal brillouin scattering induced transparency. *Nature Physics*, 11(3):275–280, 2015.

[46] Yu-Xiang Zhang, Shengjun Wu, Zeng-Bing Chen, and Yutaka Shikano. Ground-state cooling of a dispersively coupled optomechanical system in the unresolved sideband regime via a dissipatively coupled oscillator. *Physical Review A*, 94(2):023823, 2016.

[47] RW Peterson, TP Purdy, NS Kampel, RW Andrews, P-L Yu, KW Lehnert, and CA Regal. Laser cooling of a micromechanical membrane to the quantum backaction limit. *Physical Review Letters*, 116(6):063601, 2016.

[48] Dong-Yang Wang, Cheng-Hua Bai, Shutian Liu, Shou Zhang, and Hong-Fu Wang. Optomechanical cooling beyond the quantum backaction limit with frequency modulation. *Physical Review A*, 98(2):023816, 2018.

[49] Marcelo Davanco, Serkan Ates, Yuxiang Liu, and Kartik Srinivasan. Si 3 n 4 optomechanical crystals in the resolved-sideband regime. *Applied Physics Letters*, 104(4):041101, 2014.

[50] Massimiliano Rossi, Nenad Kralj, Stefano Zippilli, Riccardo Natali, Antonio Borrielli, Gregory Pandraud, Enrico Serra, Giovanni Di Giuseppe, and David Vitali. Enhancing sideband cooling by feedback-controlled light. *Physical Review Letters*, 119(12):123603, 2017.

[51] Jeremy B Clark, Florent Lecocq, Raymond W Simmonds, José Aumentado, and John D Teufel. Sideband cooling beyond the quantum backaction limit with squeezed light. *Nature*, 541(7636):191–195, 2017.

[52] Jens M Dobrindt, I Wilson-Rae, and Tobias J Kippenberg. Parametric normal-mode splitting in cavity optomechanics. *Physical Review Letters*, 101(26):263602, 2008.

[53] Simon Gröblacher, Klemens Hammerer, Michael R Vanner, and Markus Aspelmeyer. Observation of strong coupling between a micromechanical resonator and an optical cavity field. *Nature*, 460(7256):724–727, 2009.

[54] Ferdinand Verhulst. *Nonlinear differential equations and dynamical systems*. Springer Science & Business Media, 2006.

[55] Denis Mongin, Vincent Juvé, Paolo Maioli, Aurélien Crut, Natalia Del Fatti, Fabrice Vallée, Ana Sànchez-Iglesias, Isabel Pastoriza-Santos, and Luis M Liz-Marzán. Acoustic vibrations of metal-dielectric core–shell nanoparticles. *Nano Letters*, 11(7):3016–3021, 2011.

[56] Alessandra Toncelli, NE Capuj, B Garrido, Marianna Sledzinska, Clivia M Sotomayor-Torres, Alessandro Tredicucci, and Daniel Navarro-Urrios. Mechani-

cal oscillations in lasing microspheres. *Journal of Applied Physics*, 122(5):053101, 2017.

Κεφάλαιο 4

Μελέτη χωροχρονικών φωτονικών κρυστάλλων

4.1 Εισαγωγή

Ένα μεγάλο μέρος των σύγχρονων νανοφωτονικών διατάξεων, όπως οι φωτονικοί κρύσταλλοι [1] ή τα μεταϋλικά [2] στηρίζονται στην περιοδική οργάνωση των "δομικών λίθων" τους στη μίκρο-νάνο κλίμακα. Από τις πιο απλές φωτονικές διατάξεις ή, ακόμα και αυτές που εμφανίζονται στη φύση, όπως για παράδειγμα από τα φτερά της πεταλούδας[3], έως και τις πιο σύνθετες τεχνητές δομές, κατασκευασμένες με τα πιο σύγχρονα μέσα στα εργαστήρια, η χωρική περιοδικότητα παίζει κυρίαρχο ρόλο στην αλληλεπίδραση φωτός-ύλης. Επεκτείνοντας την ιδέα της περιοδικότητας, επιπλέον, και στο βαθμό ελευθερίας του χρόνου, είναι εφικτό να εφευρεθούν νέες κατηγορίες τεχνητών υλικών, όπως οι φωτονικοί χωροχρονικοί κρύσταλλοι ή τα χωροχρονικά μεταϋλικά και οι μεταεπιφάνειες [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10].

Γενικά, οι χρονικές μεταβολές σε φωτονικούς κρυστάλλους, μεταξύ άλλων, έχουν σαν αποτέλεσμα την εμφάνιση τοπολογικών φαινομένων[11, 12, 13, 14], το σχηματισμό σημείων με ασυνήθιστες ειδικές ιδιότητες (exceptional points)[15], οπτική μόνωση[16, 17], μη ερμιτιανότητα[18, 19, 20], χρονικούς μανδύες (temporal cloaking)[21], μη διατήρηση της συμμετρίας αντιστροφής Lorentz[22, 23, 24, 25], μηχανική μάθηση βασισμένη σε οπτικά κύματα[26] και χρονική υπερσυμμετρία[27, 28, 29]. Αυτά τα φαινόμενα είναι γνωστό ότι εμφανίζονται συχνά σε μαγνητικά, μη γραμμικά ή ενεργά υλικά. Όμως, μια μεταβολή στη διάσταση του χρόνου κάνει δυνατή την εμφάνιση αυτών και σε συνήθη γραμμικά, παθητικά και μη μαγνητικά υλικά.

Η πιο απλή εφαρμογή είναι ένα πλακίδιο με χρονικά μεταβαλλόμενες ιδιότητες[30, 31, 32, 33, 34], το οποίο εμφανίζει φαινόμενα μη διατήρησης της συμμετρίας αντιστροφής. Αν, επιπλέον, αυτό χρησιμοποιηθεί σε πολυστρωματικές δομές, είναι δυνατόν να κατασκευαστούν ανακλαστήρες Bragg ή υπερβολικά μέσα[35, 36, 37, 12, 38]. Εκτός από αυτές τις μονοδιάστασtατες περιοδικές δομές, είναι δυνατόν να κατασκευαστούν πρωτότυπες γεωμετρίες που βασίζονται σε δυναμικά σωματίδια, όπως για παράδειγμα με χρονικά εξαρτώμενα υλικά ή γεωμετρικές παραμέτρους[39, 40, 41, 42] (όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο). Επιπλέον, η χρήση αυτών σε περιοδικές ή ψευδοπεριοδικές γεωμετρίες, επιτρέπει την κατασκευή πιο σύνθετων δομών, όπως για παράδειγμα χωροχρονικών μεταβαλλόμενων μεταυλικών[11, 8] και μεταεπιφανειών[43, 44, 45], κάτι που δίνει απεριόριστες δυνατότητες στον έλεγχο του φωτός.

Εκτός από τα παραπάνω, σε συστήματα που χαρακτηρίζονται από κάποια χρονική μεταβολή, λαμβάνουν χώρα οπτικές μεταβάσεις, οι οποίες προκαλούν την εμφάνιση ενδιαφερόντων και δυνητικά χρήσιμων φαινομένων, όπως η μετατροπή συχνοτήτων και η δημιουργία φίλτρων. Φωτονικές μεταβάσεις, παρόμοιες με εκείνες των ηλεκτρονικών, προβλέφθηκαν σε χρονικά μεταβαλλόμενους φωτονικούς κρυστάλλους από τον Winn[46] εφαρμόζοντας την θεωρία σύζευξης των καταστάσεων (coupled mode theory). Τέτοιες μεταβάσεις μπορούν να συμβούν σε πολλές διαφορετικές φωτονικές διατάξεις, όπως σε δακτυλίδια συντονισμού[47, 48] ή σε γραμμικούς κυματοδηγούς[49], ενώ η χρονική μεταβολή μπορεί να επιτευχθεί με διάφορους τρόπους, όπως για παράδειγμα με μια ηλεκτρικά καθοδηγούμενη αλλαγή στη διηλεκτρική σταθερά[50], ή από ακουστικά ή κύματα σπιν. Παρά το γεγονός ότι έχουν πραγματοποιηθεί πολλές μελέτες για απομονωμένους διακεκριμένους συντονισμούς σε χρονικά μεταβαλλόμενα συστήματα, δεν έχουν γίνει αντίστοιχες μελέτες για καταστάσεις διαρροής σε ανοικτά συστήματα.

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται μια πλήρως δυναμική μελέτη οπτικών μεταβάσεων μεταξύ συντονισμών πεπερασμένου παράγοντα ποιότητας, Q, σε πλέγμα από σωματίδια με περιοδικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά. Τέτοιοι συλλογικοί συντονισμοί προέρχονται από την αλληλεπίδραση των πολυπολικών συντονισμών Mie των περιοδικά μεταβαλλόμενων σκεδαστών[51, 52, 53, 54, 55].

Η αλληλεπίδραση μεταξύ των διπολικών ($\ell = 1$) συντονισμών μπορεί να μελετηθεί χρησιμοποιώντας ημιαναλυτικά μοντέλα. Αυτό, όμως, είναι δύσκολο να γίνει για συλλογικούς συντονισμούς υψηλότερης τάξης ($\ell > 1$), οι οποίοι εμφανίζονται ως κορυφές με πολύ υψηλό δείκτη ποιότητας, Q, είτε στο φάσμα της ανάκλασης είτε της διέλευσης[54, 56, 57]. Για τη μελέτη αυτών, απαιτείται μια πλήρως ηλεκτροδυναμική μελέτη. Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστεί η γενίκευση της μεθόδου πολλαπλής σκέδασης[58, 59] για να είναι δυνατή η περιγραφή στρωμάτων αποτελούμενων από δυναμικούς σκεδαστές. Συγκεκριμένα, θα περιγραφούν τα φαινόμενα που δημιουργούνται από την ανελαστική σκέδαση φωτός από πλέγμα σφαιρών με περιοδικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά.

4.2 Θεωρία

Η φωτονική στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης αποτελεί έναν ευέλικτο και αποδοτικό τρόπο για γρήγορη και ακριβή ηλεκτροδυναμική μοντελοποίηση δομών που αποτελούνται από διαδοχικά, δυνητικά διαφορετικά, επίπεδα αποτελούμενα από σκεδαστές οργανωμένους με την ίδια δισδιάστατη περιοδικότητα σε ένα ομογενές περιβάλλον. Η ευελιξία της μεθόδου στηρίζεται στο γεγονός ότι οι ιδιότητες της σκέδασης για όλο το σύνθετο σύστημα υπολογίζονται μέσω των μεμονωμένων κομματιών του και με τη βοήθεια κατάλληλων συναρτήσεων διαδοτών. Έτσι, είναι πολύ εύκολο να συμπεριληφθούν, σκεδαστές ή ολόκληρα πλακίδια με διαφορετικές οπτικές ιδιότητες. Όπως έχει αναφερθεί, ενώ η μέθοδος αρχικά αναπτύχθηκε για τη μελέτη ομογενών και ισοτροπικών σφαιρικών σκεδαστών[58, 59, 60], είναι, επίσης, αποδοτική για σκεδαστές με σχήμα που να μην αποκλίνει πολύ από το σφαιρικό[61]. Αργότερα, η μέθοδος επεκτάθηκε, επιτρέποντας τη μελέτη σφαιρικών σκεδαστών αποτελούμενων από έναν αριθμό σφαιρικών κελυφών[62], χειρόμορφων (ομογενών[63] ή με επίστρωση,[64]) και γυροτροπικών[65] σφαιρών, ενώ προσθέσαμε και τη δυνατότητα προσθήκης πολλών σκεδαστών ανά κυψελίδα[54], όπως περιγράφηκε στο κεφάλαιο 1. Σε αυτήν την ενότητα, παρουσιάζεται η γενίκευση της μεθόδου πολλαπλής σκέδασης σε δυναμικούς φωτονικούς κρυστάλλους αποτελούμενους από σκεδαστές των οποίων κάποια ιδιότητα μεταβάλλεται περιοδικά με το χρόνο.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε σφαιρικό σκεδαστή, σε ένα χρονικά αμετάβλητο, ομογενές και ισοτροπικό μέσο που χαρακτηρίζεται από σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ και σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ. Η σφαίρα έχει σταθερή σχετική μαγνητική διαπερατότητα $\bar{\mu}$ και σχετική διηλεκτρική σταθερά η οποία μεταβάλλεται περιοδικά με το χρόνο γύρω από μια σταθερή τιμή $\bar{\epsilon}$, με περίοδο $2\pi/\Omega$, σύμφωνα με την εξίσωση

$$\epsilon_s(t) = \bar{\epsilon}[1 + \eta \sin{(\Omega t)}] \ , \tag{4.1}$$

όπου η είναι το σχετικό πλάτος ταλάντωσης. Σε αυτήν την περίπτωση, ένα μονοχρωματικό κύμα με γωνιακή συχνότητα ω, δημιουργεί έναν άπειρο αριθμό από εξερχόμενα κύματα με γωνιακές συχνότητες $\omega_\nu = \omega - \nu\Omega$, με ν ακέραιο (σε αυτό το κεφάλαιο θα χρησιμοποιήσουμε το σύμβολο ν, για τις δέσμες, αντί για το n, που χρησιμοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, ώστε να μην υπάρχει σύγχυση με το n του πλέγματος, το οποίο θα αναφερθεί παρακάτω), οι οποίες δημιουργούνται από την ελαστική ($\nu = 0$) και την ανελαστική ($\nu \neq 0$) σκέδαση λόγω της περιοδικά μεταβαλλόμενης σφαίρας, με παρόμοιο τρόπο με εκείνον που δείξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο για τη σφαίρα με τη περιοδικά μεταβαλλόμενη ακτίνα. Πρακτικά, περιορίζουμε τις άπειρες δέσμες σε ένα μέγιστο $|\nu| = N$ και έτσι το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο έξω από τη σφαίρα παίρνει τη μορφή

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathrm{Re}\Big\{ \sum_{\nu=-N}^{N} \mathbf{E}^{(\nu)}(\mathbf{r}) \exp[-i(\omega - \nu\Omega)t] \Big\} \ , \tag{4.2}$$

όπου

$$\mathbf{E}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{L}} [a_{\mathrm{L}}^{0(\nu)} \mathbf{J}_{\mathrm{L}}(q_\nu, \mathbf{r}) \delta_{\nu 0} + a_{\mathrm{L}}^{+(\nu)} \mathbf{H}_{\mathrm{L}}(q_\nu, \mathbf{r})] \ , \tag{4.3}$$

με $q_\nu = (\omega - \nu\Omega)\sqrt{\epsilon\mu}/c$.

Οι συντελεστές ανάπτυξης στην Εξ. (4.3) συνδέονται μεταξύ τους, μέσω του δυναμικού πίνακα t, σε αντιστοιχία με την περίπτωση της σφαίρας με την περιοδικά μεταβαλλόμενη ακτίνα [Εξ. (3.2)], δηλαδή

$$a_{\mathrm{L}}^{+(\nu)} = t_{P\ell}^{\nu\nu'} a_{\mathrm{L}}^{0(\nu')} \ , \tag{4.4}$$

για ένα προσπίπτον κύμα, γενικά, με μια γωνιακή συχνότητα $\omega - \nu'\Omega$. Η Εξ. (4.4) είναι ακριβής και υπολογίζει το πλάτος του σκεδαζόμενου σφαιρικού κύματος δοσμένου L, με γωνιακή συχνότητα $\omega_\nu = \omega - \nu\Omega$, σε σχέση με το πλάτος ενός εισερχόμενου σφαιρικού κύματος του ίδιου L (το L διατηρείται λόγω της σφαιρικής συμμετρίας των σκεδαστών), με γωνιακή συχνότητα $\omega_{\nu'} = \omega - \nu'\Omega$. Αξίζει να αναφερθεί ότι οι συχνότητες της ταλάντωσης, συμβολίζονται με κεφαλαίο Ω και είναι συνήθως τρεις με τέσσερις τάξεις μεγέθους μικρότερες από τις οπτικές συχνότητες, οι οποίες συμβολίζονται με το μικρό ω.

Στη συνέχεια, θεωρούμε ένα δισδιάστατο x-y επίπεδο που αποτελείται από πολλούς σκεδαστές ανά κυψελίδα στις θέσεις $\mathbf{R}_{n\beta} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\beta$, όπου τα $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$ με n_1, n_2 ακέραιους, είναι οι μετατοπίσεις στο πλέγμα Bravais και $\mathbf{r}_\beta$ είναι κατάλληλα μη θεμελιώδη διανύσματα μέσα τη μοναδιαία κυψελίδα. Έστω επίπεδο κύμα με συχνότητα $\omega_{\nu'}$ προσπίπτει στο πλέγμα των σφαιρών. Γενικά, μπορούμε να γράψουμε τη συνιστώσα του κυματανύσματος πάνω στο επίπεδο των σφαιρών ως $\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}'$, όπου $\mathbf{g}'$ είναι ένα συγκεκριμένο διάνυσμα αντιστρόφου πλέγματος. Το αντίστοιχο σκεδαζόμενο πεδίο με συχνότητα ω_ν έχει τη μορφή επίπεδων κυμάτων που διαδίδονται ή φθίνουν στη θετική (+) και αρνητική (−) κατεύθυνση z, με κυματανύσματα

$$\mathbf{K}^{\pm}_{\mathbf{g}\nu} = \big(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}, \pm[q_\nu^2 - (\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g})^2]^{1/2}\big), \tag{4.5}$$

όπου $\mathbf{g}$ είναι διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος και αντιστοιχούν σε διαφορετικές περιθλώμενες δέσμες. Πρέπει να αναφερθεί ότι η ψευδό ορμή-συχνότητα Floquet παραμένει αμετάβλητη, λόγω της ταυτόχρονης χωρικής και χρονικής περιοδικότητας της δομής.

Χρησιμοποιώντας το αθροιστικό θεώρημα για τις σφαιρικές αρμονικές και τις συναρτήσεις Bessel, ένα εξερχόμενο κύμα γύρω από ένα κέντρο σκέδασης μπορεί να αναπτυχθεί ως ένα εισερχόμενο κύμα για ένα διαφορετικό κέντρο, χρησιμοποιώντας κατάλληλες συναρτήσεις διαδοτών σε δοσμένη γωνιακή συχνότητα ω_ν, σε πλήρη αντιστοιχία με την Εξ.(1.67) του Κεφ.1, όπως ακολουθεί

$$\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(q_\nu, \mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'\beta'}) = \sum_{\mathrm{L}} \Omega^{n\beta;n'\beta'}_{\mathrm{LL}'}(q_\nu)\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(q_\nu, \mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\beta}). \tag{4.6}$$

Αναλυτικές εκφράσεις για τους διαδότες Ω (χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο με τη γωνιακή συχνότητα της ταλάντωσης, αλλά δεν υπάρχει σύγχυση αφού είναι ξεκάθαρο λόγω των συμφραζομένων) μπορούν να βρεθούν αλλού[58, 66].

Ακολουθώντας παρόμοια διαδικασία με εκείνη του Κεφ.1, σε αντιστοιχία με την Εξ. (1.78), καταλήγουμε στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων

$$\sum_{\nu''}\sum_{\mathrm{L}'} t_{\beta\mathrm{L}\nu;\beta\mathrm{L}'\nu''} A^{s'p'\mathbf{g}'\nu''}_{\beta\mathrm{L}\nu'} = \sum_{\nu''}\sum_{\mathrm{L}'\beta'}\Big[\delta_{\nu\nu''}\delta_{\mathrm{LL}'}\delta_{\beta\beta'} - \sum_{\mathrm{L}''\beta'} t_{\beta\mathrm{L}\nu;\beta\mathrm{L}''\nu''}\Omega_{\beta\mathrm{L}'\nu'';\beta'\mathrm{L}'\nu''}\Big] B^{+s'p'\mathbf{g}'\nu''}_{\beta'\mathrm{L}'\nu'}, \tag{4.7}$$

όπου

$$t_{\beta\mathrm{L}\nu;\beta'\mathrm{L}'\nu'} = \delta_{\beta\beta'}\delta_{\mathrm{LL}'} t^{(\beta)\nu\nu'}_{P\ell}. \tag{4.8}$$

Στα στοιχεία t έχει προστεθεί ο δείκτης β, ο οποίος δεν υπάρχει στην Εξ.(4.4), διότι οι σφαίρες στις διάφορες θέσεις β, μπορεί να είναι μην είναι όμοιες και να χαρακτηρίζονται από διαφορετικό πίνακα σκέδασης. Επιπλέον

$$A^{sp\mathbf{g}\nu}_{\beta H\ell m\nu'} = \delta_{\nu\nu'}\, 4\pi i^{\ell}(-1)^{m+1}\exp(i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}\nu}\cdot\mathbf{r}_\beta)\mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}\nu})\cdot\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}\nu}) \tag{4.9}$$

$$A^{sp\mathbf{g}\nu}_{\beta E\ell m\nu'} = \delta_{\nu\nu'}\, 4\pi i^{\ell}(-1)^{m+1}\exp(i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}\nu}\cdot\mathbf{r}_\beta)[\mathbf{X}_{\ell-m}(\hat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}\nu})\times\hat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}\nu}]\cdot\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}\nu}), \tag{4.10}$$

ενώ τα στοιχεία $\Omega_{\beta\mathrm{L}\nu;\beta'\mathrm{L}'\nu'}$ δίνονται από το δισδιάστατο μετασχηματισμό Fourier των συναρτήσεων των διαδοτών

$$\Omega_{\beta\mathrm{L}\nu;\beta'\mathrm{L}'\nu'} = \delta_{\nu\nu'}\sum_{n'}\Omega^{n\beta;n'\beta'}_{\mathrm{LL}'}(q_\nu)\exp[-i\mathbf{k}_\parallel\cdot(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_{n'})]\,, \tag{4.11}$$

με $\mathbf{k}_\parallel$ την παράλληλη συνιστώσα στο επίπεδο του κυματανύσματος $\mathbf{q}$ ανοιγμένου στη ζώνη Brillouin του δισδιάστατου κρυστάλλου. Στη συνέχεια είναι βολικό να ορίσουμε ένα συλλογικό πίνακα σκέδασης T, ο οποίος περιγράφει όλες τις πολλαπλές σκεδάσεις, ως εξής

$$\mathbf{T} = (\mathbf{t}^{-1} - \mathbf{\Omega})^{-1}, \tag{4.12}$$

όπου τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{t}$ δίνονται από την Εξ. (4.8), ενώ του πίνακα $\mathbf{\Omega}$ δίνονται από την Εξ. (4.11).

Οι συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης της διάταξης των σφαιρών, στη συγκεκριμένη βάση επίπεδων κυμάτων, μπορούν να υπολογιστούν[58, 59, 66] χρησιμοποιώντας το συλλογικό πίνακα **T**, όπως ορίστηκε στην Εξ. (4.12) και, παρόμοια με το Κεφ.1, βρίσκουμε για τον πίνακα **S**

$$S_{sp\mathbf{g}\nu;s'p'\mathbf{g}'\nu'} = \delta_{ss'}\delta_{pp'}\delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}\delta_{\nu\nu'} + \sum_{\beta \mathrm{L}\nu''}\sum_{\beta'\mathrm{L}'\nu'''} \Delta^{\beta\mathrm{L}\nu''}_{sp\mathbf{g}\nu} T_{\beta\mathrm{L}\nu'';\beta'\mathrm{L}'\nu'''} A^{s'p'\mathbf{g}'\nu'}_{\beta'\mathrm{L}'\nu'''} \;, \tag{4.13}$$

όπου $s, s' = \pm$ και

$$\Delta^{\beta H\ell m\nu'}_{sp\mathbf{g}\nu} = \delta_{\nu\nu'} \, \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{q_\nu A_0 K^{+}_{\mathbf{g}\nu;z}} \exp(-i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}\nu}\cdot\mathbf{r}_\beta)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}\nu})\cdot\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}\nu}), \tag{4.14}$$

$$\Delta^{\beta E\ell m\nu'}_{sp\mathbf{g}\nu} = \delta_{\nu\nu'} \, \frac{2\pi(-i)^{\ell}}{q^2_\nu A_0 K^{+}_{\mathbf{g}\nu;z}} \exp(-i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}\nu}\cdot\mathbf{r}_\beta)[\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}\nu})\times\hat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}\nu}]\cdot\hat{\mathbf{e}}_p(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}\nu}) \;, \tag{4.15}$$

όπου A_0 είναι η επιφάνεια της μοναδιαίας κυψελίδας. Αξίζει να αναφερθεί ότι, ορίζοντας τους παραπάνω Block διαγώνιους πίνακες, η Εξ. (4.13) μπορεί να γραφεί σε πιο συμπαγή μορφή: $\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{\Delta}\mathbf{T}\mathbf{A}$. Ο **I** είναι ο μοναδιαίος πίνακας, ο **T** είναι ένας τετραγωνικός πίνακας που δίνει το σκεδαζόμενο πεδίο σε σχέση με το προσπίπτον στην σφαιρική αναπαράσταση, και οι **A**, $\mathbf{\Delta}$ είναι πίνακες με κατάλληλες διαστάσεις, οι οποίοι μετασχηματίζουν το προσπίπτον κύμα σε σφαιρικά κύματα και το σκεδαζόμενο κύμα από σφαιρικά κύματα σε επίπεδα, αντίστοιχα.

Για ένα επίπεδο κύμα εισερχόμενο στο πλέγμα των σφαιρών, για παράδειγμα κατά μήκος της θετικής z κατεύθυνσης, με κυματάνυσμα $\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}'\nu'}$ και πόλωση p', η συνολική διέλευση δίνεται από

$$\mathcal{T} = \sum_{\nu=-N}^{N}\sum_{p\mathbf{g}} |S_{+p\mathbf{g}\nu;+p'\mathbf{g}'\nu'}|^2 \frac{\mathrm{Re}\{K^{+}_{\mathbf{g}\nu;z}\}}{K^{+}_{\mathbf{g}'\nu';z}} \equiv \sum_{\nu=-N}^{N}\sum_{p\mathbf{g}} \mathcal{T}_{p\mathbf{g}\nu} \equiv \sum_{\nu=-N}^{N} \mathcal{T}_\nu \tag{4.16}$$

και

$$\mathcal{R} = \sum_{\nu=-N}^{N}\sum_{p\mathbf{g}} |S_{-p\mathbf{g}\nu;+p'\mathbf{g}'\nu'}|^2 \frac{\mathrm{Re}\{K^{+}_{\mathbf{g}\nu;z}\}}{K^{+}_{\mathbf{g}'\nu';z}} \equiv \sum_{\nu=-N}^{N}\sum_{p\mathbf{g}} \mathcal{R}_{p\mathbf{g}\nu} \equiv \sum_{\nu=-N}^{N} \mathcal{R}_\nu \;, \tag{4.17}$$

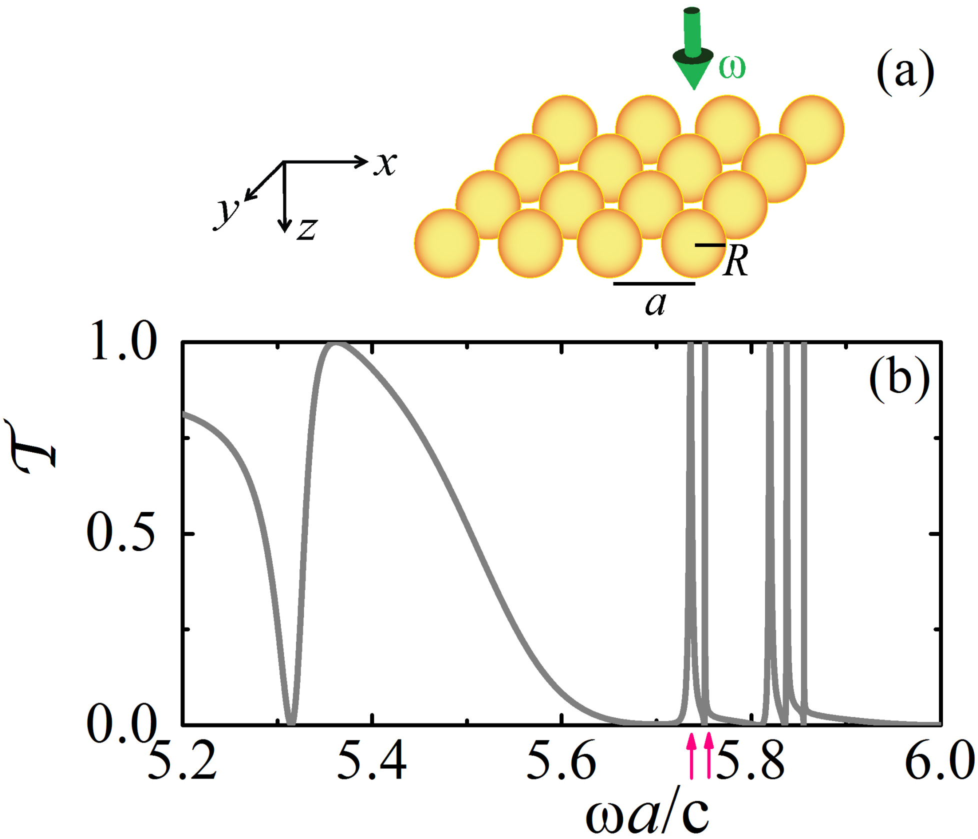
αντίστοιχα.

Στις παραπάνω εξισώσεις, τα $\mathcal{T}_\nu$ και $\mathcal{R}_\nu$ είναι οι συντελεστές της διέλευσης και οι ανάκλασης, αντίστοιχα, της ν-ής τάξης ανελαστικής σκέδασης, που δίνει δέσμες με συχνότητες $\omega - \nu\Omega$, ενώ τα $\mathcal{T}_{p\mathbf{g}\nu}$ και $\mathcal{R}_{p\mathbf{g}\nu}$ είναι οι συνιστώσες συγκεκριμένης πόλωσης και τάξης περίθλασης. Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι ακόμα και στις περιπτώσεις που τα υλικά δεν έχουν απώλειες, η ενέργεια δεν διατηρείται, όταν πρόκειται για χρονικά μεταβαλλόμενα μέσα, όπως είδαμε και στην περίπτωση της μεμονωμένης σφαίρας. Έτσι, όταν $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R} > 0$ (< 0) υποδηλώνεται ότι μεταφέρεται ενέργεια από (στο) ηλεκτρομαγνητικό πεδίο στις (από) δυναμικές σφαίρες.

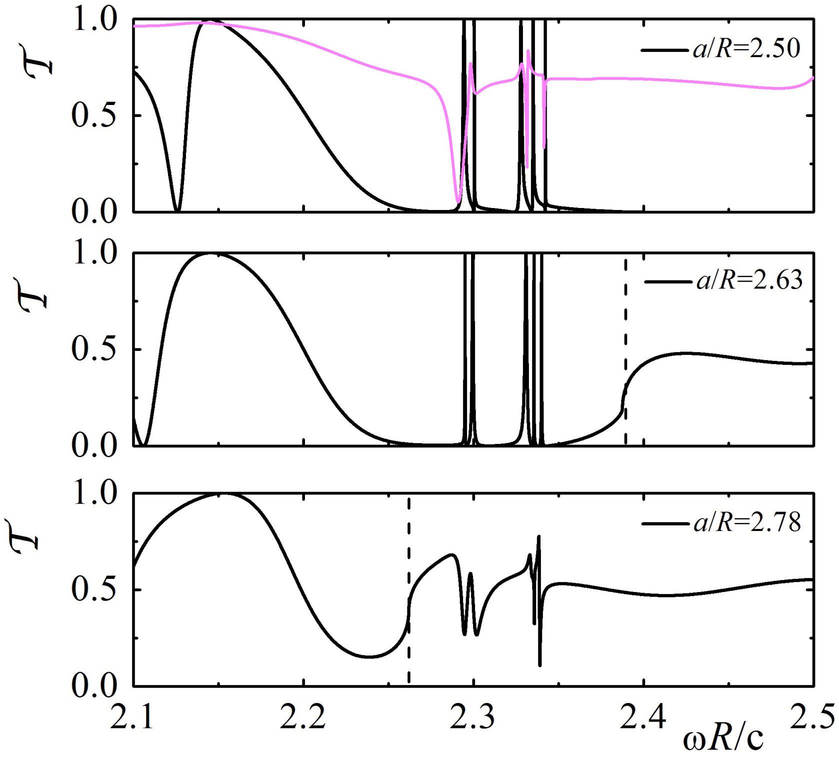
4.3 Σκέδαση από πλέγμα με χρονικά μεταβαλλόμενες σφαίρες

4.3.1 Στατικό πλέγμα από σφαίρες

Αρχικά, θεωρούμε ένα τετραγωνικό πλέγμα (με πλεγματική σταθερά a), που αποτελείται από διηλεκτρικές σφαίρες με σταθερή μαγνητική διαπερατότητα $\bar{\mu} = 1$ και διηλεκτρική σταθερά $\bar{\epsilon} = 12$, χαρακτηριστικά τα οποία είναι τυπικά για πυρίτιο στο υπέρυθρο μέρος του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, στον αέρα. Η ακτίνα των σφαιρών είναι σταθερή $R = 0.4a$. Η σχηματική αναπαράσταση της υπό μελέτη δομής φαίνεται στο Σχ. 4.1(a). Η μελέτη γίνεται σε μήκη κύματος μεγαλύτερα από την περιοδικότητα του πλέγματος ($\lambda > a$), κάτι που σημαίνει ότι δεν εμφανίζονται περιθλώμενες δέσμες. Το εισερχόμενο φως είναι γραμμικά πολωμένο με γωνιακή συχνότητα ω και, αρχικά, θεωρούμε ότι προσπίπτει κάθετα στο επίπεδο των σφαιρών όπως φαίνεται στο Σχ. 4.1(a). Ένα μέρος από το φάσμα της διέλευσης, όπως υπολογίζεται με τη μέθοδο LMS, φαίνεται στο Σχ. 4.1(b). Αν υποθέσουμε ότι η πλεγματική σταθερά είναι $a = 10$ μm, το μήκος κύματος στο Σχ. 4.1(b) παίρνει τιμές από $\lambda = 12.1$ μm εώς $\lambda = 10.5$ μm. Το φάσμα της διέλευσης σε αυτήν την περιοχή είναι πολύ πλούσιο, εμφανίζονται πολλές κορυφές και κοιλάδες, κάτι το οποίο είναι σύνηθες για πλέγματα που αποτελούνται απο διηλεκτρικές σφαίρες με υψηλό δείκτη διάθλασης[60]. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των συντονισμών Mie των μεμονωμένων σφαιρών γεννά συλλογικές καταστάσεις του πλέγματος, οι οποίες αναδεικνύονται, συνήθως, ως ασύμμετροι συντονισμοί Fano στο αντίστοιχο φάσμα της διέλευσης. Η μορφή της κορυφής καθορίζεται από τις σχετικές φάσεις[67].



Σχήμα 4.1: (a) Μια σχηματική αναπαράσταση του υπό μελέτη στατικού πλέγματος: Τετραγωνικό πλέγμα (με πλεγματική σταθερά a) αποτελούμενο από νανοσωματίδια ακτίνας $R = 0.4a$, τα οποία έχουν σταθερή διαπερατότητα $\bar{\mu} = 1$ και σχετική διηλεκτρική σταθερά $\bar{\epsilon} = 12$ στον αέρα. Γραμμικά πολωμένο μονοχρωματικό φως γωνιακής συχνότητας ω προσπίπτει κάθετα στο επίπεδο. (b) Το φάσμα της διέλευσης της γεωμετρίας που περιγράφεται στο (a), σε ένα εύρος συχνοτήτων όπου υπάρχουν πολλές κορυφές. Οι δύο συντονισμοί υψηλής ποιότητας-Q που βρίσκονται κοντά στο $\omega a/c = 5.74$, στους οποίους υπάρχουν τα δύο κατακόρυφα βέλη, οφείλονται στους $\ell = 4$ Mie συντονισμούς ηλεκτρικού τύπου ($P = E$) των μεμονωμένων σφαιρών.



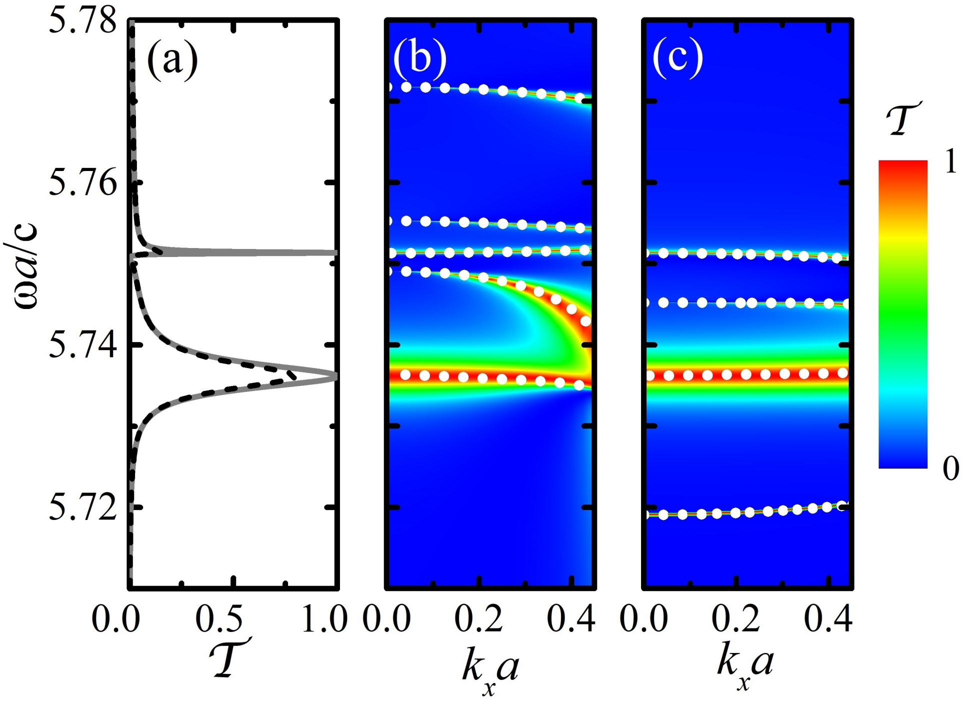
Σχήμα 4.2: Η διέλευση γραμμικά πολωμένου μονοχρωματικού φωτός, γωνιακής συχνότητας ω, όταν προσπίπτει κάθετα σε ένα τετραγωνικό πλέγμα από σφαιρικά νανοσωματίδια σταθερής ακτίνας R, τα οποία έχουν σχετική διηλεκτρική σταθερά ίση με $\bar{\epsilon} = 12$ και μαγνητική επιδεκτικότητα $\bar{\mu} = 1$, στον αέρα, για διαφορετικές τιμές της πλεγματικής σταθεράς a. Οι κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές δείχνουν τις θέσεις του ορίου περίθλασης, $\lambda = a$ (λ είναι το μήκος κύματος στο μέσο στο οποίο διαδίδεται το φως). Το φάσμα της διέλευσης που φαίνεται στο επάνω διάγραμμα με τη μαύρη καμπύλη είναι όμοιο με εκείνο του Σχ. 4.1(b), αλλά είναι σχεδιασμένο σε συνάρτηση με την αδιάστατη συχνότητα $\omega R/c$ αντί για το $\omega a/c$. Φαίνεται ότι, με την αύξηση της απόστασης, a, μεταξύ των σφαιρών, η αλληλεπίδραση μεταξύ των καταστάσεων του πλέγματος γίνεται πιο ασθενής, κάτι που φαίνεται σαν μια μετατόπιση του αντίστοιχου φάσματος της διέλευσης. Μεγάλες αλλαγές στη φάσμα συμβαίνουν όταν το $a > \lambda$ και, έτσι, είναι δυνατή πλέον η περίθλαση. Επιπλέον, η προσθήκη ενός υποστρώματος από γυαλί με διηλεκτρική σταθερά $n = 1.5$, για $a/R = 2.5$ μειώνει το όριο περίθλασης στο $\omega R/c = 1.676$ και δίνει τη διέλευση που απεικονίζεται με ροζ καμπύλη στο επάνω διάγραμμα.

Για παράδειγμα, ο συντονισμός του πλέγματος στη συχνότητα $\omega a/c = 5.321$ για $k_{\|} = 0$ είναι ασύμμετρος, όπως φαίνεται στο φάσμα στο Σχ. 4.1(b), όπου η διέλευση είναι 0% στην $\omega a/c = 5.315$ και φτάνει 100% στη $\omega a/c = 5.362$. Επειδή, τα υλικά δεν έχουν απώλειες, είναι εύκολο να υπολογίσει κανείς το αντίστοιχο φάσμα ανάκλασης από τη σχέση $\mathcal{R} = 1-\mathcal{T}$. Αξίζει να σημειώσουμε ότι, αν αυξηθεί η απόσταση, a, μεταξύ των σφαιρών (διατηρώντας σταθερή την ακτίνα S), η αλληλεπίδραση μεταξύ των συντονισμών του πλέγματος γίνεται ασθενέστερη. Έτσι, οι αντίστοιχες κορυφές στο φάσμα της διέλευσης μετατοπίζονται α- νάλογα. Η εικόνα του φάσματος αλλάζει δραματικά όταν $a > \lambda$, όταν δηλαδή εμφανίζεται το φαινόμενο της περίθλασης, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.2. Ακόμα, πρέπει να αναφερθεί ότι υπάρχει συμφωνία μεταξύ της μεθόδου LMS και του COMSOL, όπως έχει δειχθεί και σε προηγούμενο κεφάλαιο αλλά και σε πολλές δημοσιεύσεις της ομάδας μας[68, 69, 54]. Όμως, οι υπολογισμοί που απαιτούνται για φάσματα που αποτελούνται από υψηλής ποιότητας κορυφές, όπως το υπό μελέτη φάσμα, έχουν πολύ μεγάλη απαίτηση σε μνήμη και σε χρόνο για το COMSOL, και ακόμα περισσότερο σε μεθόδους finite-difference time-domain (FDTD). Με τη μέθοδο LMS, το φάσμα του Σχ. 4.1(b) απαιτεί μόλις λίγα δευτερόλεπτα για έναν επεξεργαστή Intel(R) Core(TM) i7-4930K.

Θα ασχοληθούμε με τις δύο χαρακτηριστικές κορυφές στη διέλευση, υψηλού συντελεστή ποιότητας Q, κοντά στο $\omega a/c = 5.74$, οι οποίες είναι σημειωμένες με κατακόρυφα βέλη στο Σχ. 4.1b. Οι κορυφές αυτές οφείλονται στους συντονισμούς Mie για $\ell = 4$, ηλεκτρικού τύπου ($P = E$) των μεμονωμένων σφαιρών και αντιστοιχούν σε διπλά εκφυλισμένες καταστάσεις του πλέγματος, κάτι που διαπιστώνεται εύκολα από τη θεωρία ομάδων.

Στο Σχ 4.3a φαίνεται με περισσότερη λεπτομέρεια το φάσμα γύρω από αυτές τις δύο κορυφές. Και στις δύο, η διέλευση παίρνει τιμή 100% σε περίπτωση που δεν υπάρχουν απώλειες. Αλλά και στην αντίθετη περίπτωση, αυτές παραμένουν, όπως φαίνεται με τη διακεκομμένη καμπύλη του Σχ.4.3(a). Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε τις απώλειες, λόγω των υλικών, αμελητέες.

Στα Σχ. 4.3(b) και 4.3(c) απεικονίζεται η διέλευση στην περίπτωση που το κύμα προσπίπτει μη κάθετα ($k_{\|} \neq 0$), με το ηλεκτρικό πεδίο να είναι πολωμένο παράλληλα ή κάθετα, δηλαδή για πολώσεις p και s αντίστοιχα. Για την περίπτωση της p πόλωσης εμφανίζονται πέντε μπάντες συντονισμού στην διέλευση, ενώ για s, υπάρχουν τέσσερις. Από το πολυπολικό ανάπτυγμα υποδεικνύεται ότι και οι εννιά μπάντες συντονισμού στα Σχ.4.3(b) και



Σχήμα 4.3: (a) Συνεχής γραμμή: Μια μεγέθυνση του φάσματος της διέλευσης του Σχ. 4.1(b), κοντά στις κορυφές με τα κατακόρυφα βέλη. Διακεκομμένες γραμμές: Το ίδιο φάσμα αν συμπεριληφθούν οι απώλειες, θεωρώντας για τη διηλεκτρική σταθερά των σφαιρών ότι $\mathrm{Im}\{\bar{\epsilon}\} = 10^{-3}$. (b), (c) Το αντίστοιχο φάσμα της διέλευσης, αγνοώντας τις απώλειες, για p- και s-πολωμένο φως, αντίστοιχα, όταν προσπίπτει υπό γωνία $\theta = \arcsin \frac{k_x a}{(\omega a/c)}$, η οποία αντιστοιχεί σε $\mathbf{k}_\parallel = (k_x, 0)$. Οι επιπλέον συντονισμοί που εμφανίζονται στο φάσμα δεν διεγείρονται (είναι ανενεργοί) στην κάθετη πρόσπτωση. Οι κλειστοί άσπροι κύκλοι αντιστοιχούν στο πραγματικό μέρος των ιδιοσυχνοτήτων, που υπολογίζονται από τους πόλους του πίνακα T, όπως προκύπτει από την Εξ. (4.12).

4.3(c), προέρχονται από τους $\ell = 4$ συντονισμούς Mie ηλεκτρικού τύπου, ενώ στο υπό μελέτη εύρος συχνοτήτων δεν υπάρχουν άλλες μπάντες. Επιπλέον, υπολογίσαμε τις μιγαδικές ιδιοσυχνότητες του πλέγματος από τους πόλους του πίνακα σκέδασης T που δίνεται από την Εξ (4.12). Τα πραγματικά μέρη αυτών των ιδιοσυχνοτήτων, που αντιστοιχούν στις καταστάσεις Mie για $\ell = 4$ ηλεκτρικού τύπου, είναι σημειωμένα με άσπρους κύκλους στο Σχ. 4.3(b), 4.3(c) και, όπως φαίνεται, συμφωνούν απόλυτα με τους συντονισμούς της σκέδασης. Λαμβάνοντας όλα τα προηγούμενα υπόψιν, είναι ξεκάθαρο ότι αυτές οι εννιά μπάντες προέρχονται από τον εννιά φορές εκφυλισμό $(2\ell + 1)$ των $\ell = 4$ ηλεκτρικού τύπου συντονισμών Mie, ο οποίος αίρεται όταν οι σφαίρες οργανωθούν σε πλέγμα λόγω της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης.

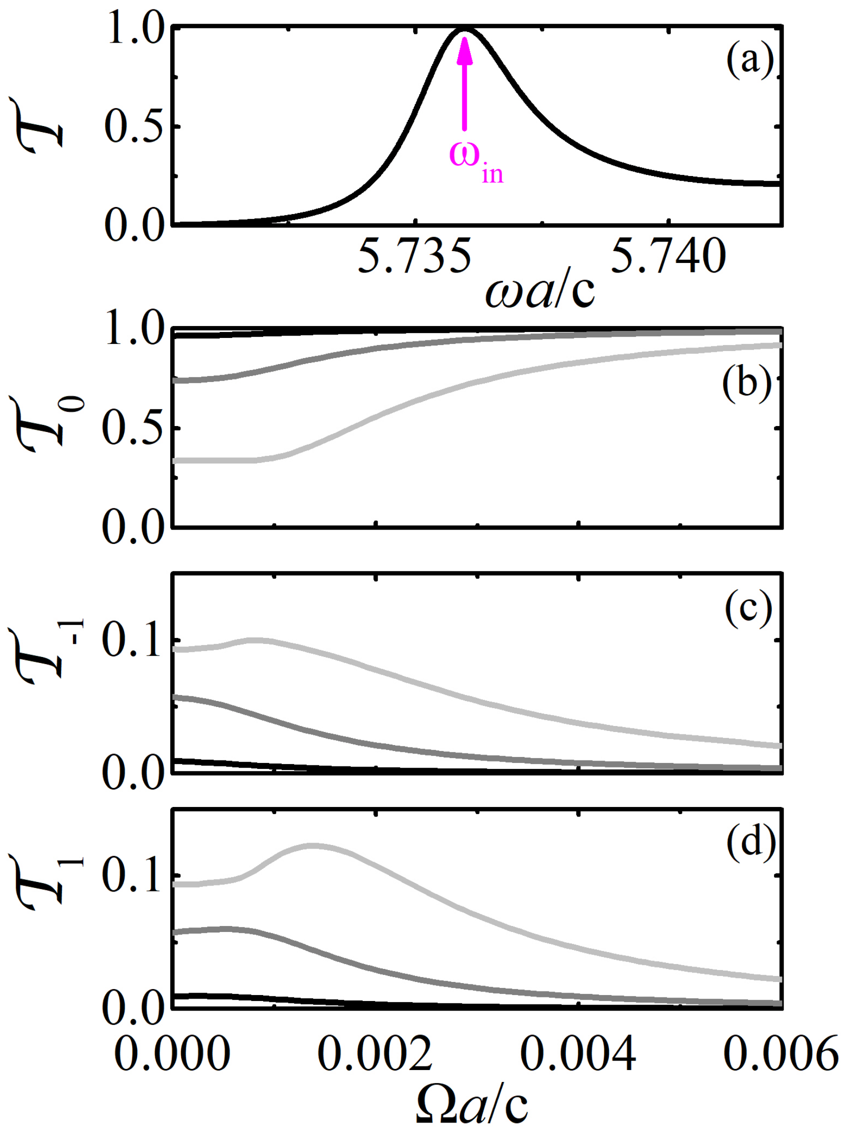
Έτσι, σύμφωνα με τη θεωρία ομάδων, για $k_{||} = 0$, ο εννιαπλός εκφυλισμός των $\ell = 4$ ηλεκτρικών συντονισμών των μεμονωμένων σφαιρών αίρεται και προκύπτουν δύο διπλά εκφυλισμένοι συντονισμοί και πέντε μη εκφυλισμένοι. Όταν το φως προσπίπτει κάθετα, διεγείρονται μόνο οι διπλά εκφυλισμένοι[60], ενώ οι υπόλοιποι πέντε είναι ανενεργοί και ονομάζονται dark modes.

Ο διπλός εκφυλισμός των δύο αυτών καταστάσεων για $k_{||} = 0$, αίρεται όταν $k_{||} \neq 0$, δηλαδή για μη κάθετη πρόσπτωση. Σε αυτήν την περίπτωση ενεργοποιούνται και οι εννιά συντονισμοί όταν το φως έχει την κατάλληλη πόλωση. Ειδικότερα, καταστάσεις οι οποίες είναι άρτιες ή περιττές στον καθρεπτισμό στο επίπεδο πρόσπτωσης, ανήκουν σε διαφορετικό μη αναγωγίσιμο υπόχωρο και διεγείρονται για p- ή s- πολωμένο φως αντίστοιχα.

4.3.2 Πλέγμα με χρονικά μεταβαλλόμενες σφαίρες

Μέχρι εδώ, θεωρήσαμε ένα πλέγμα που αποτελείται από σφαίρες με σταθερή διηλεκτρική σταθερά. Τώρα, θα μελετήσουμε και την οπτική απόκριση της ίδιας γεωμετρίας στην περίπτωση που η διηλεκτρική σταθερά των σφαιρών ταλαντώνεται σε συνάρτηση με το χρόνο, σύμφωνα με την Εξ. (4.1).

Σε προηγούμενες μελέτες, έχει δειχθεί ότι η παρουσία μιας χρονικά περιοδικής μεταβολής έχει μεγάλη επίδραση στην ενεργό διατομή σκέδασης μεμονωμένων σωματιδίων και αναδεικνύει πολύ ενδιαφέροντα φαινόμενα. Όμως, μεταεπιφάνειες αποτελούμενες από τέτοιους χρονικά μεταβαλλόμενους σκεδαστές οργανωμένους περιοδικά στο χώρο δίνουν περισσότερους βαθμούς ελευθερίας και, έτσι, μεγαλύτερες δυνατότητες για τη κατά βούληση διαμόρ-



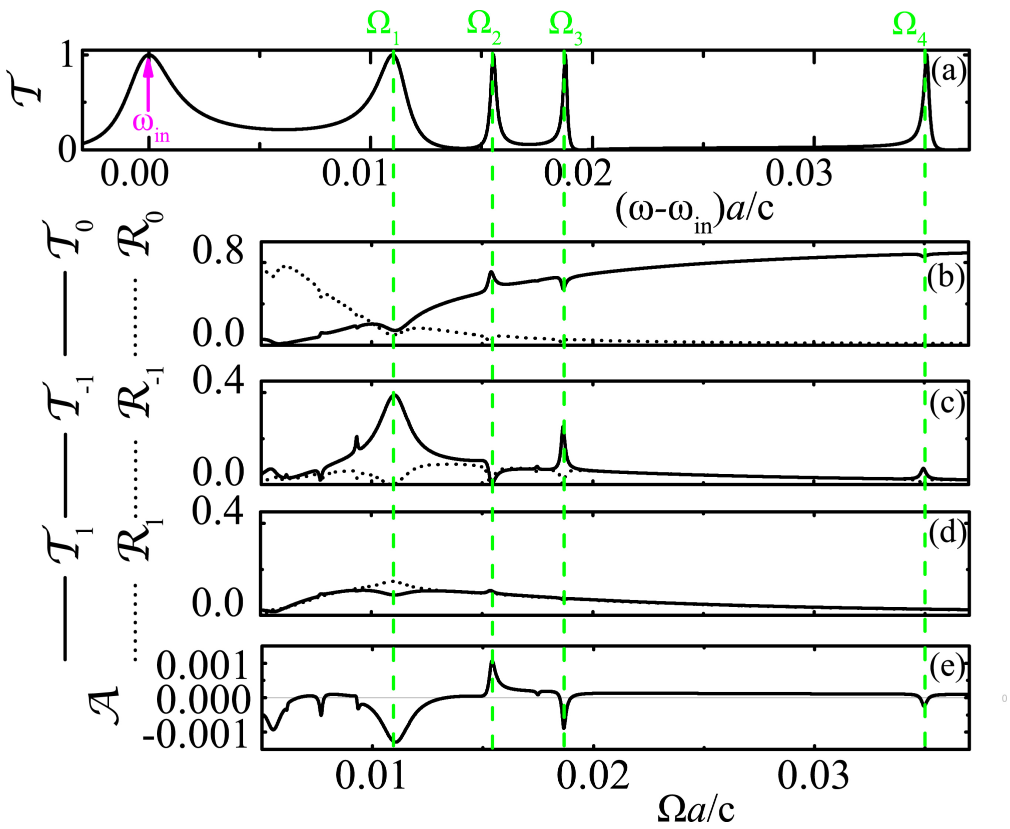
Σχήμα 4.4: (a) Το φάσμα διέλευσης για τη στατική περίπτωση της δομής του Σχ. 4.1(a), κοντά στο χαμηλότερο συντονισμό του Σχ.4.1(b) για p-πολωμένο φως που προσπίπτει στο επίπεδο x-z υπό γωνία $\theta = 3°$ σε σχέση με τον άξονα z, με συχνότητα $\omega_{\rm in} a/c = 5.736$. (b) Η ελαστική Rayleigh συνιστώσα της διέλευσης, $\mathcal{T}_0$, του δυναμικού συστήματος για προσπίπτον κύμα συχνότητας $\omega_{\rm in}$, σε συνάρτηση με τη συχνότητα ταλάντωσης, $\Omega a/c$, για $\eta = 10^{-4}$ (μαύρη γραμμή), $\eta = 3 \times 10^{-4}$ (σκούρη γκρι), $\eta = 7 \times 10^{-4}$ (ανοικτό γκρι). (c) Η αντίστοιχη anti-Stokes ($\omega_{\rm in} + \Omega$) δέσμη, $\mathcal{T}_{-1}$. (d) Η αντίστοιχη Stokes($\omega_{\rm in} - \Omega$) δέσμη, $\mathcal{T}_1$.

φωση της οπτικής απόκρισης του συστήματος. Στο υπό μελέτη πλέγμα, ο εκφυλισμός των συντονισμών Mie αίρεται και οι μη ενεργοί συντονισμοί ενεργοποιούνται στην περίπτωση της μη κάθετης πρόσπτωσης. Στο Σχ. 4.4 φαίνεται η επίδραση της χρονικής ταλάντωσης στην περίπτωση πρόσπτωσης p-πολωμένου φωτός στο επίπεδο x-z, υπό γωνία $\theta = 3°$ σε σχέση με τον άξονα z, με συχνότητα $\omega_{\text{in}} a/c = 5.736$, που αντιστοιχεί σε συντονισμό, όπου το αντίστοιχο στατικό σύστημα είναι διαφανές και η διέλευση ειναι ίση με μονάδα, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.4(a).

Στα Σχ.4.4(b), 4.4(c), και 4.4(d) φαίνονται οι μεταβολές στη διέλευση των δεσμών $\nu = 0$ (Rayleigh), $\nu = -1$ (anti-Stokes), και $\nu = 1$ (Stokes), αντίστοιχα, για διαφορετικά πλάτη ταλάντωσης η. Για μικρές τιμές του η, όπως για παράδειγμα για $\eta = 10^{-4}$, παρατηρούνται μικρές αλλαγές. Η ελαστική συνιστώσα της διέλευσης παρουσιάζει μικρή μείωση, ενώ εμφανίζονται οι ανελαστικές δέσμες πρώτης τάξης (anti-Stokes και Stokes). Όσο αυξάνεται το η, η ανελαστική διέλευση ενισχύεται και σταδιακά γίνονται σημαντικές και οι μεγαλύτερης τάξης δέσμες, ενώ, ταυτόχρονα, η αντίστοιχη, Rayleigh μειώνεται περισσότερο Σχ. 4.7. Αυτό είναι εμφανές και στο όριο των χαμηλών συχνοτήτων ταλάντωσης, $\Omega \simeq 0$, όπου παρουσιάζεται σημαντική μείωση της $\mathcal{T}_0$, ευνοώντας την $\mathcal{T}_{\pm 1}$. Σε αυτό το όριο, τα αποτελέσματα είναι πανομοιότυπα με εκείνα που παίρνουμε από την αδιαβατική προσέγγιση, όπου υπολογίζεται μια χρονικά εξαρτώμενη διέλευση (ή ανάκλαση), μέσω στατικών υπολογισμών σε διαδοχικά στιγμιότυπα, μέσα σε μια περίοδο της ταλάντωσης της διηλεκτρικής συνάρτησης[70, 39, 71].

Η πιθανότητα της μετάβασης εξαρτάται, εκτός από το ολοκλήρωμα αλληλεπικάλυψης των καταστάσεων, και από την πυκνότητα της αρχικής (στο ω_{in}) και των τελικών (στα $\omega_{\text{in}} - \Omega$ και $\omega_{\text{in}} + \Omega$) οπτικών καταστάσεων. Έτσι, όταν το Ω αυξηθεί και ξεπεράσει το πλάτος του συντονισμού, παρατηρείται εξασθένηση των ανελαστικών δεσμών, ενώ, ταυτόχρονα η συνιστώσα Rayleigh $\mathcal{T}_0$ αυξάνεται και πάλι προς τη μονάδα. Γι' αυτό το λόγο, όταν η συχνότητα ταλάντωσης γίνει μεγαλύτερη, η ταλάντωση δεν επηρεάζει το φάσμα της διέλευσης ιδιαίτερα, αφού η πυκνότητα των οπτικών καταστάσεων μειώνεται δραστικά έξω από τον συντονισμό. Στην περίπτωση, όμως, που άλλοι συντονισμοί είναι κοντά, η εικόνα αλλάζει πολύ και εμφανίζονται έντονες οπτικές μεταβάσεις.

Στο Σχ. 4.5(a) απεικονίζονται και οι πέντε κορυφές στο φάσμα της διέλευσης της στατικής περίπτωσης, όπως φαίνονται στο Σχ.4.3(b), για p-πολωμένο προσπίπτον φως



Σχήμα 4.5: (a) Το φάσμα διέλευσης της στατικής γεωμετρίας του Σχ.4.1(a), όταν προσπίπτει κύμα με συχνότητα, $\omega_{\text{in}} a/c = 5.736$, στο χαμηλότερο συντονισμό που φαίνεται στο Σχ. 4.3(b) για p-πολωμένο φως, υπό γωνία $\theta = 3°$ αναφορικά με τον άξονα z. (b) Η ελαστική Rayleigh συνιστώσα της διέλευσης και ανάκλασης, $\mathcal{T}_0$ και $\mathcal{R}_0$, αντίστοιχα, του δυναμικού συστήματος για δεδομένη συχνότητα εισερχόμενου φωτός ω_{in}, σε συνάρτηση με την συχνότητα ταλάντωσης της διηλεκτρικής σταθεράς , $\Omega a/c$, για $\eta = 0.0045$. (c) Οι αντίστοιχες anti-Stokes ($\omega_{\text{in}} + \Omega$) δέσμες, $\mathcal{T}_{-1}$ και $\mathcal{R}_{-1}$. (d) Οι αντίστοιχες Stokes ($\omega_{\text{in}} - \Omega$) δέσμες, $\mathcal{T}_1$ και $\mathcal{R}_1$. (e) Η συνολική απορρόφηση λόγω της χρονικής μεταβολής της σχετικής διηλετρικής σταθεράς. Το αρνητικό πρόσημο υποδηλώνει απορρόφηση.

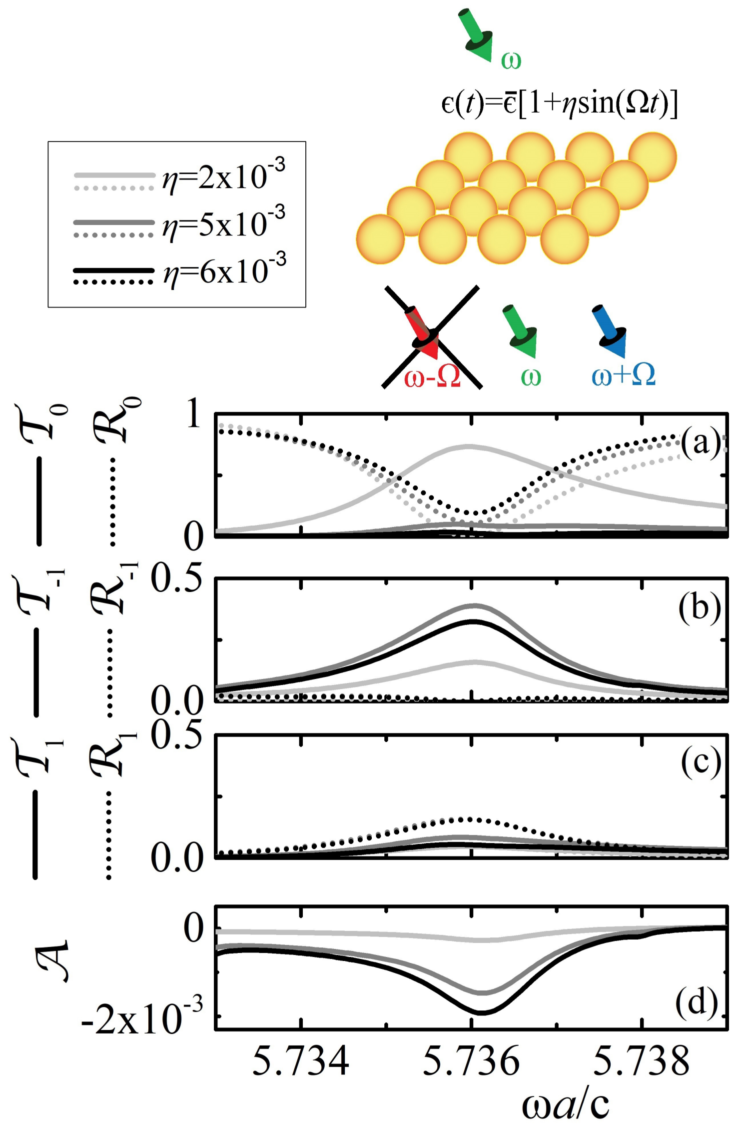
σε γωνία $\theta = 3°$. Αρχικά, διατηρούμε σταθερή τη συχνότητα του προσπίπτοντος φωτός $\omega_{\rm in}a/c = 5.736$ και θεωρούμε ότι η διηλεκτρική συνάρτηση ταλαντώνεται περιοδικά σύμφωνα με την Εξ.4.1.

Αφού η αρχική πυκνότητα οπτικών καταστάσεων (στην $\omega_{\rm in}$) παραμένει σταθερή και δεν υπάρχουν κοντινοί συντονισμοί στις μικρότερες συχνότητες, αναμένουμε ότι, όσο αυξάνεται το Ω, η διέλευση της ελαστικής και των ανελαστικών δεσμών θα εξαρτάται έντονα από την πυκνότητα των οπτικών καταστάσεων στη συχνότητα $\omega_{\rm in} + \Omega$. Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, για μικρά πλάτη ταλάντωσης, η ελαστική συνιστώσα Rayleigh παραμένει κοντά στη μονάδα, εκτός και αν η τελική κατάσταση βρίσκεται και εκείνη σε συντονισμό, όπου η πυκνότητα καταστάσεων είναι και εκεί υψηλή. Η ανελαστική σκέδαση γίνεται πιο έντονη για μεγαλύτερα πλάτη ταλάντωσης, όποτε διαλέξαμε $\eta = 0.0045$. Στα Σχ.4.5(b), 4.5(c), και 4.5(d) παρουσιάζονται οι συνιστώσες Rayleigh, anti-Stokes, και Stokes της διέλευσης και της ανάκλασης, όπως υπολογίστηκαν από τη δυναμική μέθοδο LMS. Το αντίστοιχο φάσμα της απορρόφησης φαίνεται στο Σχ.4.5(e), η οποία υπολογίζεται από τη σχέση $\mathcal{A} = 1-\mathcal{T}-\mathcal{R}$. Υπενθυμίζουμε ότι τα υλικά δεν εμφανίζουν απώλειες, συνεπώς η ύπαρξη μη μηδενικής απορρόφησης οφείλεται καθαρά στην ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου και των χρονικά μεταβαλλόμενων σφαιρών.

Αρχικά, θα αναφερθούμε στην περιοχή που το $\Omega a/c \equiv \Omega_1 a/c \simeq 0.011$, όπου η διέλευση της ελαστικής δέσμης παρουσιάζει έντονη μείωση, όπως επίσης και τη ανάκλασή της. Αυτή, συνοδεύεται από μια αύξηση στην ανελαστική δέσμη anti-Stokes, όπως και φαίνεται στο Σχ. 4.5(c), ενώ η αντίστοιχη ανάκλαση παραμένει σχεδόν μηδενική. Τέτοια συμπεριφορά είναι συνηθισμένη σε μεταβάσεις τριπλού συντονισμού, όπου η συχνότητα ταλάντωσης, στην περίπτωσή μας το Ω_1, είναι ίση με τη διαφορά των συχνοτήτων του εισερχόμενου και του εξερχόμενου κύματος $\omega_{\rm out} = \omega_{\rm in} + \Omega_1$, όταν και οι δύο $\omega_{\rm in}$ και $\omega_{\rm out}$ αντιστοιχούν σε συντονισμούς. Σε αυτήν την περίπτωση εμφανίζεται μεταφορά ενέργειας στο εξερχόμενο πεδίο, κάτι που φαίνεται από την έντονη πτώση στο φάσμα της απορρόφησης στο Σχ. 4.5(e), για $\Omega = \Omega_1$. Το αρνητικό πρόσημο της απορρόφησης υποδηλώνει ότι η ενέργεια εκπέμπεται από το ταλαντούμενο σύστημα. Ενδιαφέρον παρουσιάζει ότι μικρές πτώσεις στο φάσμα της απορρόφησης εμφανίζονται σε υποπολλαπλάσια του Ω_1. Αυτά, αντιστοιχούν σε τριπλές οπτικές μεταβάσεις που εμπλέκουν περισσότερα από ένα κβάντα της ταλάντωσης της διηλεκτρικής σταθεράς. Επίσης αξίζει να αναφερθεί ότι, όπως φαίνεται στο Σχ.4.5(d), η κορυφή που αντιστοιχεί στη δέσμη anti-Stokes δεν εμφανίζεται στην αντίστοιχη Stokes, κάτι που εξηγείται εύκολα, αφού το εξερχόμενο κύμα στη συχνότητα $\omega_{\text{out}} = \omega_{\text{in}} - \Omega_1$ δεν αποτελεί συχνότητα συντονισμού. Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και για $\Omega = \Omega_3$ και $\Omega = \Omega_4$, όμως το φαινόμενο είναι πιο ασθενές.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει και ο συντονισμός που παρατηρείται για συχνότητα ταλάντωσης Ω_2, ο οποίος αντιστοιχεί σε απευθείας οπτικές μεταβάσεις από τον πρώτο στον τρίτο συντονισμό [Σχ.4.5(a)], κάτι που υποδηλώνεται από την χαρακτηριστική κορυφή στην απορρόφηση, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.5(e). Σε αυτήν την περίπτωση, όμως, δεν παρατηρείται εκπομπή ενέργειας από το ταλαντούμενο σύστημα, αλλά απορρόφηση. Η διέλευση και η απορρόφηση της αντίστοιχης δέσμης anti-Stokes παρουσιάζουν και οι δύο απότομη πτώση, ενώ δεν υπάρχει κάποιο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό στο φάσμα της συνιστώσας Stokes. Ταυτόχρονα, η διέλευση της Rayleigh εμφανίζει μια κορυφή η οποία είναι αρκετά μικρότερη σε σχέση με την στατική περίπτωση. Αυτή η συμπεριφορά, αποδεικνύει ότι η συγκεκριμένες οπτικές μεταβάσεις εμποδίζουν την εμπροσθοσκέδαση ή οπισθοσκέδαση του εξερχόμενου κύματος στο μακρινό πεδίο, με αποτέλεσμα η ενέργεια να μένει εγκλωβισμένη μέσα στο πλέγμα. Αυτό επιβεβαιώθηκε και με επιπλέον αναλυτικούς υπολογισμούς, χρησιμοποιώντας τη προσέγγιση Born πρώτης τάξης, η οποία ανέδειξε ότι το σχετικό ολοκλήρωμα επικάλυψης μεταξύ του εισερχόμενου και εξερχόμενου κύματος, πρακτικά, μηδενίζεται, λόγω της μορφής των πεδίων. Αυτό, όμως, δεν ισχύει όταν επιτρέπονται τα διάφορα κανάλια της περίθλασης, δηλαδή όταν η συχνότητα του εξερχόμενου κύματος βρίσκεται πάνω από το κατώφλι περίθλασης. Σε αυτήν την περίπτωση, το εξερχόμενο φως μπορεί αν εξέλθει μέσω των δεσμών περίθλασης υψηλότερης τάξης και, έτσι, οι συγκεκριμένες τριπλές οπτικές μεταβάσεις, πλέον, εκδηλώνονται ως κορυφές στο φάσμα της διέλευσης της δέσμης anti-Stokes.

Αξίζει να αναφερθεί ότι για τιμές της συχνότητα $\Omega a/c$ από 0.02 έως 0.034, όπου δεν υπάρχει κανένας οπτικός συντονισμός στο στατικό σύστημα, η διέλευση των δεσμών anti-Stokes $\mathcal{T}_{-1}$ και Stokes $\mathcal{T}_1$ ($\mathcal{R}_1$) παραμένουν σε παρόμοια χαμηλά επίπεδα και παρουσιάζουν πολύ ομαλές διακυμάνσεις, ενώ η αντίστοιχη απορρόφηση παραμένει σχεδόν μηδέν. Είναι, λοιπόν, ξεκάθαρο ότι η ισχυρή ανελαστική σκέδαση συνοδεύεται από μεταφορά ενέργειας και συμβαίνει όταν η συχνότητα ταλάντωσης Ω ταιριάζει με την διαφορά συχνοτήτων μεταξύ δύο οπτικών συντονισμών (ή ακέραιο υποπολλαπλάσιο αυτών). Το πιο χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι για $\Omega = \Omega_1$, όπου το προσπίπτον φως με συχνότητα ω_{in}, εξέρχεται με



Σχήμα 4.6: Πάνω διάγραμμα: Σχηματική αναπαράσταση του περιοδικού πλέγματος αποτελούμενο από σφαίρες με χρονικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά. Φως γωνιακής συχνότητας ω προσπίπτει στο επίπεδο x-z υπό γωνία $\theta = 3°$ σε σχέση με τον άξονα z, με p πόλωση. Η συχνότητα της ταλάντωσης της διηλεκτρικής σταθεράς είναι $\Omega a/c = \Omega_1 a/c = 0.011$ και το $\omega a/c$ μεταβάλλεται γύρω από το συντονισμό κοντά στο 5.736. Με την κατάλληλη προσαρμογή του πλάτους της ταλάντωσης, μπορεί να επιτευχθεί ισχυρή μετατροπή της συχνότητας σε υψηλότερη τιμή. (a) Η ελαστική Rayleigh συνιστώσα της διέλευσης (συνεχής γραμμή) και ανάκλασης (εστιγμένη γραμμή), $\mathcal{T}_0$ και $\mathcal{R}_0$, αντίστοιχα, του δυναμικού συστήματος για τρεις διαφορετικές τιμές του πλάτους ταλάντωσης, $\eta = 2 \times 10^{-3}$ (ανοικτό γκρι), $\eta = 5 \times 10^{-3}$ (σκούρο γκρι), και $\eta = 6 \times 10^{-3}$ (μαύρο). (b) Οι αντίστοιχες anti-Stokes ($\omega + \Omega_1$) δέσμες, $\mathcal{T}_{-1}$ και $\mathcal{R}_{-1}$. (c) Οι αντίστοιχες Stokes ($\omega - \Omega_1$) δέσμες, $\mathcal{T}_1$ και $\mathcal{R}_1$. (d) Η συνολική απορρόφηση λόγω της χρονικής μεταβολής της διηλετρικής σταθεράς. Το αρνητικό πρόσημο υποδηλώνει απορρόφηση.

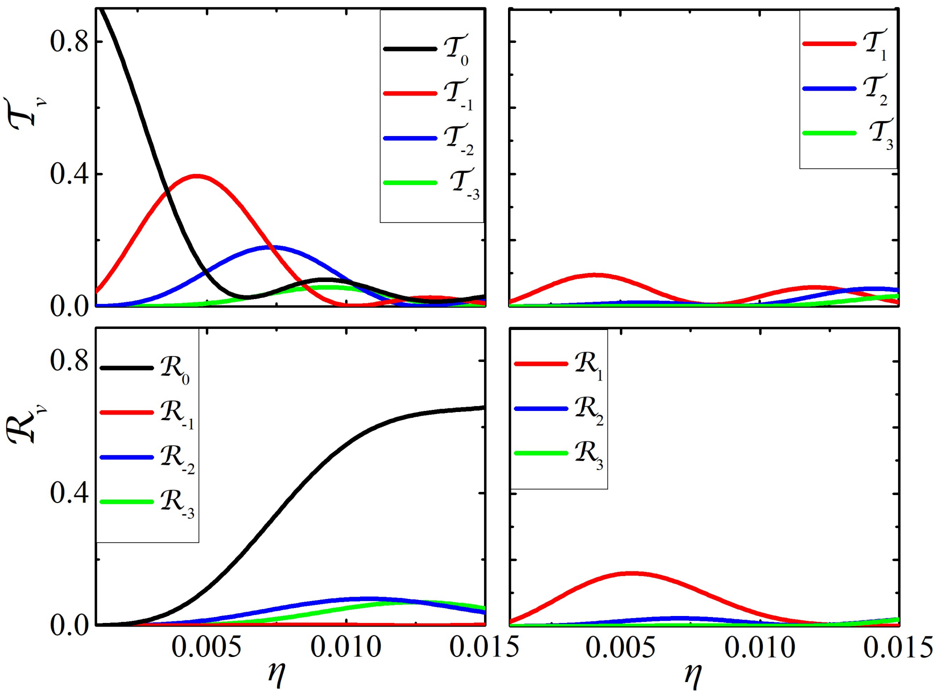
συχνότητα $\omega_{\rm in} + \Omega_1$ με διέλευση σχεδόν 40% και μηδενική ανάκλαση.

Γι αυτό, στη συνέχεια, θα εστιάσουμε στη οπτική μετάβαση από την $\omega_{\rm in}$ στην $\omega_{\rm in} + \Omega_1$, στην οποία εμφανίζεται πολύ έντονη ανελαστική εμπροσθοσκέδαση (διέλευση) και θα εξετάσουμε την εξάρτηση αυτής σε σχέση με το πλάτος της ταλάντωσης, η, διατηρώντας το Ω σταθερό στην Ω_1. Θεωρούμε ότι το εισερχόμενο φως είναι p-πολωμένο, έχει γωνιακή συχνότητα ω κοντά στην $\omega_{\rm in}$ και προσπίπτει στο πλέγμα στο επίπεδο x-z υπό γωνία $\theta = 3^\circ$ σε σχέση με τον άξονα z.

Στο Σχ. 4.6(a) απεικονίζονται οι ελαστικές συνιστώσες την διέλευσης (συνεχείς γραμμές) και της ανάκλασης (διακεκομμένες γραμμές), για τρεις διαφορετικές τιμές του η: $\eta = 2 \times 10^{-3}$ (ανοικτό γκρι), $\eta = 5 \times 10^{-3}$ (σκούρο γκρι), και $\eta = 6 \times 10^{-3}$ (μαύρο). Υπενθυμίζουμε ότι στην στατική περίπτωση ($\eta = 0$) στη συχνότητα $\omega = \omega_{\rm in}$ ο οπτικός συντονισμός παρουσιάζει διέλευση ίση με μονάδα.

Αυξάνοντας λίγο το πλάτος της ταλάντωσης, και συγκεκριμένα για $\eta = 2 \times 10^{-3}$, παρατηρείται μια μικρή μείωση της ελαστικής συνιστώσας της διέλευσης, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.6(a). Αυτή η μείωση αποδίδεται στην εμφάνιση της μικρής κορυφής στη διέλευση της ανελαστικής δέσμης anti-Stokes ($\mathcal{T}_{-1}$), όπως φαίνεται στο Σχ. 4.6(b). Αντίθετα, στο Σχ. 4.6(c), δε φαίνεται να υπάρχει κάποια αξιόλογη μεταβολή ούτε στη διέλευση ούτε στην ανάκλαση της δέσμης Stokes, παραμένοντας και οι δύο σε πολύ χαμηλά επίπεδα. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα, τη μετατροπή της αρχικής συχνότητα σε μεγαλύτερη, αφού εμφανίζεται μεταφορά ενέργειας, από την ελαστική δέσμη, προς τη διέλευση της anti-Stokes. Η διαδικασία αυτή, είναι εμφανής και στο Σχ. 4.6(d), όπου η απορρόφηση παρουσιάζει μια μικρή πτώση, της οποίας το αρνητικό πρόσημο υποδηλώνει ότι μεταφέρεται ενέργεια προς το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, από το περιοδικά μεταβαλλόμενο σύστημα.

Αν αυξήσουμε ακόμα περισσότερο το η κατά περίπου δυόμιση φορές ($\eta = 5 \times 10^{-3}$), παρατηρούμε μια μεγάλη εξασθένηση στη διέλευση της ελαστικής δέσμης, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.6(a). Αυτή η μείωση συνοδεύεται από μια μικρή αύξηση στην ανάκλαση της ελαστικής δέσμης, αλλά το πιο σημαντικό είναι η πολύ μεγάλη αύξηση της διέλευσης της ανελαστικής δέσμης $\mathcal{T}_{-1}$, η οποία φτάνει σχεδόν 45%. Η μεταφορά ενέργειας στη δέσμη Stokes είναι πιο ασθενής, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.6(c). Η μεταφορά ενέργειας από το περιοδικά ταλαντούμενο σύστημα προς το Η/Μ πεδίο φαίνεται ξεκάθαρα από το φάσμα της απορρόφησης, το οποίο απεικονίζεται στο Σχ. 4.6(d) με σκουρόχρωμη γκρι καμπύλη. Η απορρόφηση είναι



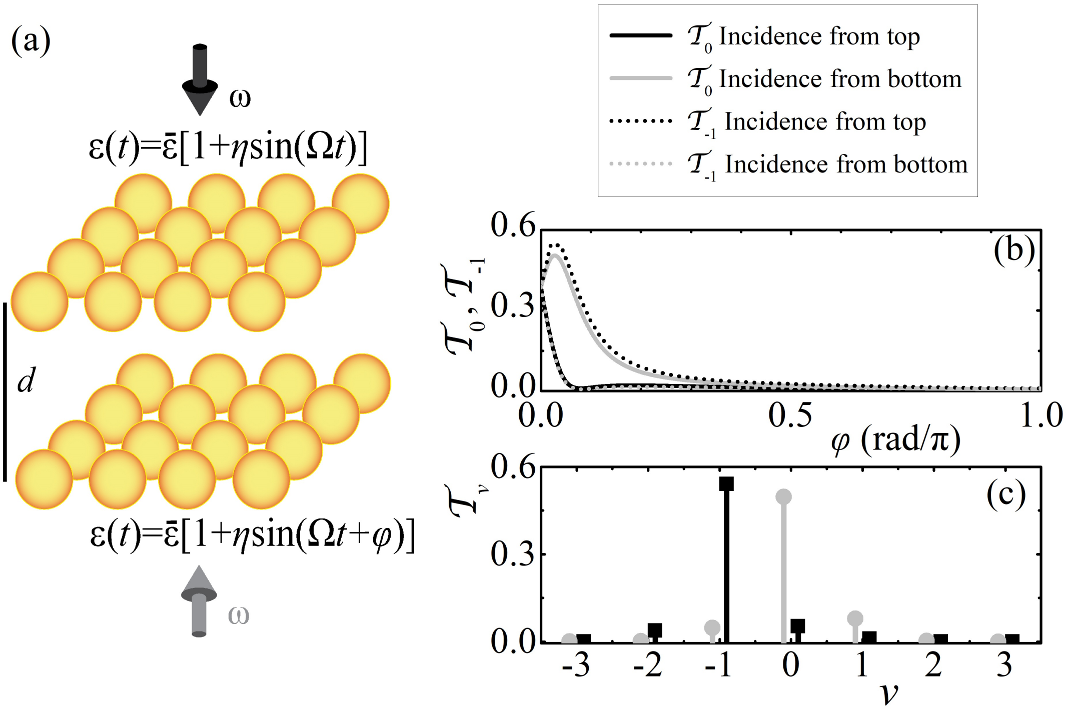
Σχήμα 4.7: Η ελαστική ($\nu = 0$) και οι ανελαστικές ($\nu = \pm 1, \pm 2, \pm 3$) δέσμες της διέλευσης, $\mathcal{T}_\nu$, και της ανάκλασης, $\mathcal{R}_\nu$, ενός τετραγωνικού πλέγματος, με θεμελιώδη διανύσματα $(a, 0)$ και $(0, a)$, που αποτελείται από σφαιρικούς σκεδαστές με ακτίνα $R = 0.4a$, οι οποίες έχουν διηλεκτρική σταθερά που ταλαντώνεται περιοδικά με το χρόνο $\epsilon(t) = \bar{\epsilon}[1 + \eta \sin(\Omega t)]$, με $\bar{\epsilon} = 12$, και μαγνητική επιδεκτικότητα $\bar{\mu} = 1$, στον αέρα, σε συνάρτηση με το πλάτος ταλάντωσης η. Ένα μονοχρωματικό κύμα προσπίπτει στο επίπεδο x-z, υπό γωνία $\theta = 3°$, σε σχέση με τον άξονα z, με πόλωση p και συχνότητα $\omega_{\mathrm{in}} a/c = 5.736$, η οποία αντιστοιχεί σε συντονισμό. Η συχνότητα ταλάντωσης της διηλεκτρικής σταθεράς, $\Omega a/c = \Omega_1 a/c = 0.011$, είναι ίση ακριβώς με την απόσταση μέχρι τον επόμενο συντονισμό, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.5. Είναι φανερό ότι, όταν το πλάτος ταλάντωσης ξεπεράσει το 0.004, οι ανελαστικές δέσμες μεγαλύτερης τάξης γίνονται σημαντικές, ενώ οι αντίστοιχες Stokes και anti-Stokes μειώνονται. Όταν το η γίνει σχετικά μεγάλο ($\eta \sim 0.01$), πλέον, κυριαρχεί η ελαστική συνιστώσα της ανάκλασης. Για μεγάλα πλάτη ταλάντωσης, οι συντονισμοί του στατικού συστήματος έχουν σημαντική μεταβολή στις συχνότητές τους και, έτσι, η παραπάνω συμπεριφορά μπορεί να εξηγηθεί με βάση την ημιστατική προσέγγιση. Συγκεκριμένα, η ταλάντωση της διηλεκτρικής σταθεράς, προκαλεί ταλάντωση στη θέση της κορυφής του συντονισμού με την ίδια περίοδο και με μέγιστη μετατόπιση ανάλογη του η. Αν αυτή η μετατόπιση είναι πολύ μεγαλύτερη από το εύρος του συντονισμού, το ω_{in} τον περισσότερο χρόνο είναι εκτός συντονισμού και βρίσκεται σε περιοχή υψηλής ανακλαστικότητας.

αρνητική, συνεπώς έχουμε ενίσχυση του H/M πεδίου. Πολύ ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι αν αυξήσουμε ακόμα περισσότερο το πλάτος της ταλάντωσης, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.6(c), για $\eta = 6 \times 10^{-3}$ (μαύρη γραμμή), η δέσμη $\mathcal{T}_{-1}$ μειώνεται, ενώ η αντίστοιχη ενίσχυση συνεχίζει να αυξάνεται [Σχ. 4.6(d)]. Αυτό εξηγείται από το γεγονός ότι η μεταφορά της ενέργειας ενισχύεται λόγω της συνεισφοράς σε ανελαστικές δέσμες υψηλότερης τάξης (Σχ. 4.7). Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω, είναι εμφανές ότι βελτιστοποιώντας το πλάτος ταλάντωσης, μαζί με άλλες παραμέτρους του συστήματος, είναι δυνατόν κάποιος να πετύχει μετατροπή σε υψηλότερες συχνότητες, με ταυτόχρονη πολύ ισχυρή εμπροσθοσκέδαση. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί, ότι μια εντελώς ανάλογη συμπεριφορά παρατηρείται αν τα $\omega_{\rm in}$ και $\omega_{\rm out}$ αντιστραφούν, αλλά αυτή τη φορά ισχυρή θα είναι η δέσμη Stokes και έτσι θα επιτυγχάνεται μετατροπή σε χαμηλότερες συχνότητες και απορρόφηση ενέργειας.

4.3.3 Πολυστρωματική χρονικά μεταβαλλόμενη δομή

Η δυναμική μεταεπιφάνεια που περιγράφηκε παραπάνω δίνει τη δυνατότητα για αλλαγή της συχνότητας του προσπίπτοντος φωτός είτε αυξάνοντάς τη, είτε μειώνοντάς τη, και, ταυτόχρονα, είναι πλήρως κατευθυντική, αφού λειτουργεί μόνο για τη διέλευση και όχι για την ανάκλαση. Η παραπάνω ιδιότητα, η οποία εμφανίζεται λόγω της περιοδικής ταλάντωσης της διηλεκτρικής σταθεράς των σφαιρών, παρουσιάζει πολύ μεγάλο τεχνολογικό ενδιαφέρον, αφού μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή οπτικών μονωτών και φίλτρων με ταυτόχρονη μεταβολή συχνοτήτων[16, 18, 43]. Το φαινόμενο αυτό, όμως, δεν παρουσιάζει μη διατήρηση της συμμετρίας αντιστροφής, αφού δεν αλλάζει η συμπεριφορά της δομής είτε το φως εισέλθει από τη μία πλευρά είτε από την άλλη. Αν, όμως συνδυαστεί με ένα φίλτρο συχνοτήτων, είναι δυνατόν να κατασκευαστούν φίλτρα που επιτρέπουν τη διάδοση μόνο προς τη μια κατεύθυνση. Πιο συγκεκριμένα, αν προστεθεί ένα στατικό φίλτρο, στο σύστημα που συζητήθηκε στο Σχ. 4.6, το οποίο μπλοκάρει την ελαστική δέσμη, αλλά επιτρέπει την διέλευση της κυρίαρχης ανελαστικής δέσμης, προκύπτει ένα σύστημα που μπλοκάρει το φως για δεδομένη συχνότητα, αν εισέλθει από την πλευρά του στατικού φίλτρου, αλλά είναι σε μεγάλο βαθμό διαφανές αν το φως προσπίπτει από την πλευρά του δυναμικού επιπέδου, χάρη στο μηχανισμό αύξησης της συχνότητας.

Ένας δεύτερος τρόπος για να επιτευχθεί σπάσιμο της συμμετρίας αντιστροφής, είναι να χρησιμοποιηθεί η ίδια περιοδική ταλάντωση, αλλά με μια διαφορά φάσης σε διαφορετικά ση-



Σχήμα 4.8: (a) Σχηματική αναπαράσταση του διπλού στρώματος, το οποίο αποτελείται από δύο πανομοιότυπα τετραγωνικά πλέγματα σφαιρών, όπως αυτά του Σχ. 4.1(a), που βρίσκονται σε σχετική απόσταση $d = a$ μεταξύ τους, κατά μήκος του άξονα z. Στις σφαίρες και των δύο επιπέδων η διηλεκτρική τους σταθερά ταλαντώνεται με τον ίδιο τρόπο ($\Omega a/c = 0.014$ και $\eta = 4 \times 10^{-3}$), αλλά έχουν μια διαφορά φάσης ϕ. Φως γωνιακής συχνότητας $\omega_{\mathrm{in}} a/c = 5.728$ προσπίπτει κάθετα στη γεωμετρία, είτε από την πάνω πλευρά (μαύρο βέλος), είτε από την κάτω (γκρι βέλος). (b) Η μεταβολή της ελαστικής Rayleigh (συνεχείς γραμμές) και της anti-Stokes (διακεκομμένες γραμμές) συνιστώσας της διέλευσης, για φως που προσπίπτει στη γεωμετρία του (a) από επάνω (μαύρες γραμμές) ή από κάτω (γκρι γραμμές), σε συνάρτηση με τη διαφορά φάσης ϕ. (c) Η ελαστική και οι πρώτες ανελαστικές δέσμες της διέλευσης για φως που προσπίπτει στη γεωμετρία του (a) από επάνω (μαύρες μπάρες) ή από κάτω (γκρι μπάρες), για διαφορά φάσης $\phi = 0.04\pi$.

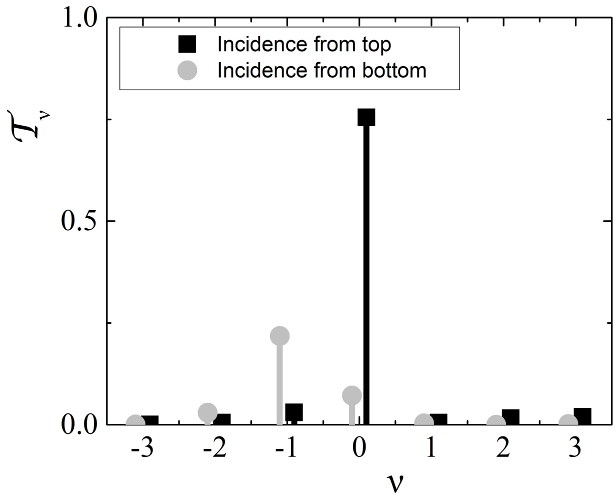
μεία της δομής[72, 73, 74], γιατί με αυτόν τον τρόπο σπάει η συμμετρία αντιστροφής χρόνου για οποιαδήποτε στιγμή. Με βάση αυτή τη στρατηγική, μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα τέτοιο φίλτρο, χρησιμοποιώντας δύο πλέγματα από σφαίρες με περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη διηλεκτρική σταθερά που δίνεται από την Εξ. (4.1), έχοντας το ίδιο πλάτος και συχνότητα ταλάντωσης, αλλά με μια διαφορά φάσης. Τα δύο αυτά επίπεδα είναι όμοια με αυτά που έχουμε περιγράψει μέχρι τώρα και το ένα είναι πάνω από το άλλο, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.8(a), σε μια σχετικά μεγάλη απόσταση, $d = a$. Η συντονισμοί των μεμονωμένων σφαιρών αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και γεννούν διαχωρισμένες καταστάσεις, σε αναλογία με το σχηματισμό των μοριακών δεσμικών και αντιδεσμικών τροχιακών, λόγω της αλληλεπίδρασης των ατομικών καταστάσεων. Για παράδειγμα, οι διπλά εκφυλισμένες καταστάσεις του μεμονωμένου επιπέδου για $k_{\|} = 0$ στη συχνότητα $\omega a/c = 5.736$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.3(a), δίνουν δύο διπλά εκφυλισμένους συντονισμούς στο διπλό επίπεδο, σε συχνότητες $\omega a/c = 5.728$ και 5.742, οι οποίες εκδηλώνονται ως πολύ οξείες κορυφές στο φάσμα της διέλευσης. Όπως και προηγουμένως, θέλοντας να πετύχουμε τριπλές οπτικές μεταβάσεις, θεωρούμε προσπίπτον κύμα κάθετο στη δομή με συχνότητα ίση με εκείνη του πρώτου συντονισμού, $\omega_{\text{in}}a/c = 5.728$, και επιλέγουμε τη συχνότητα ταλάντωσης έτσι ώστε να ταιριάζει με το δεύτερο συντονισμό, συγκεκριμένα $\Omega a/c = 0.014$.

Επειδή η οπτική απόκριση του διπλού επιπέδου για δοσμένη φάση ϕ για πρόσπτωση από επάνω είναι ίδια με τη φάση $-\phi$ με πρόσπτωση από κάτω, μπορούμε να περιορίσουμε την βελτιστοποίηση που θα πραγματοποιήσουμε στο ανοικτό διάστημα $0 < \phi < \pi$. Για οποιαδήποτε τιμή σε αυτό το εύρος, η διαφορά φάσης ϕ προκαλεί σπάσιμο της συμμετρίας αντιστροφής χώρου και χρόνου του συστήματος και οδηγεί σε οπτική απόκριση με έλλειψη συμμετρίας αμοιβαιότητας, (non reciprocity) όπως περιγράφεται από την ομάδα του S.Wan[73] για ένα ζεύγος χρονικά μεταβαλλόμενων ακουστικών συντονιστών.

Με βάση τους υπολογισμούς μας, εμφανίζονται σχετικά έντονα φαινόμενα για πλάτος ταλάντωσης $\eta = 4 \times 10^{-3}$. Στο Σχ. 4.8(b) φαίνονται οι αντίστοιχες δέσμες Rayleigh και anti-Stokes για τη διέλευση, για προσπίπτον φως κάθετα στη δομή από επάνω και από κάτω, σε συνάρτηση με την διαφορά φάσης ϕ.

Μπορούμε να πετύχουμε ισχυρή κατευθυντική διέλευση, επιλεκτικά, χρησιμοποιώντας διαφορά φάσης $\phi = 0.04\pi$. Στην περίπτωση πρόσπτωσης από επάνω, το μεγαλύτερο μέρος της διέλευσης οφείλεται στην $\mathcal{T}_0$, ενώ από την κάτω πλευρά υπερισχύει η διέλευση της

$\mathcal{T}_{-1}$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.8(c). Εναλλακτικά μπορεί να επιτευχθεί και ασυμμετρία για τη συνολική διέλευση. Κάνοντας την αντίστοιχη βελτιστοποίηση, βρίσκουμε, τελικά, τις παραμέτρους που φαίνονται στο Σχ. 4.9 και επιτυγχάνεται ,όπως φαίνεται στο ίδιο σχήμα, διέλευση μεγαλύτερη κατά 2.6 φορές κατά την πρόσπτωση από την μια πλευρά σε σχέση με την άλλη.



Σχήμα 4.9: Η ελαστική ($\nu = 0$) και οι ανελαστικές ($\nu = \pm1, \pm2, \pm3$) δέσμες της διέλευσης, $\mathcal{T}_\nu$, ενός διπλού στρώματος, που αποτελείται από δύο πανομοιότυπα τετραγωνικά πλέγματα, που χαρακτηρίζονται από θεμελιώδη διανύσματα $(a, 0)$ και $(0, a)$, αποτελούμενα από σφαιρικούς σκεδαστές ακτίνας $R = 0.4a$. Τα δύο επίπεδα απέχουν μεταξύ τους απόσταση $d = 1.56a$, κατά μήκος του άξονα z, και βρίσκονται στον αέρα. Οι σφαίρες έχουν διηλεκτρική σταθερά που ταλαντώνεται περιοδικά με το χρόνο $\epsilon(t) = \bar{\epsilon}[1 + \eta \sin(\Omega t + \phi)]$, με $\bar{\epsilon} = 12$, και μαγνητική επιδεκτικότητα $\bar{\mu} = 1$. Και στα δύο πλέγματα οι ταλαντώσεις έχουν την ίδια συχνότητα ($\Omega a/c = 0.0033$) και πλάτος ($\eta = 1.3 \times 10^{-3}$), αλλά έχουν μια διαφορά φάσης $\phi = 0.38\pi$. Φως γωνιακής συχνότητας $\omega_{\text{in}} a/c = 5.7515$ προσπίπτει είτε από την πάνω πλευρά (μαύρες μπάρες), είτε από την κάτω (γκρι μπάρες). Φαίνεται ότι, έχοντας διαλέξει τις παραπάνω παραμέτρους, μετά από βελτιστοποίηση, δημιουργείται έντονο σπάσιμο συμμετρίας αντιστροφής. Όταν το κύμα προσπίπτει από την πάνω πλευρά η συνολική διέλευση είναι περίπου 2.6 φορές μεγαλύτερη, σε σχέση με την πρόσπτωση από την άλλη πλευρά.

4.4 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, αναπτύξαμε μια γενίκευση της φωτονικής μεθόδου LMS, η οποία μπορεί να περιγράψει πλέγματα από σφαιρικούς σκεδαστές, στους οποίους η διηλεκτρική σταθερά (ή άλλο χαρακτηριστικό) μεταβάλλεται περιοδικά με το χρόνο . Η μέθοδος αυτή αποτελεί ένα ευέλικτο εργαλείο για την αναζήτηση νέων δομών με χωροχρονική περιοδικότητα και μάλιστα με πολύ μικρή απαίτηση σε υπολογιστική ισχύ, σε σχέση με τις μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών, ενώ, ταυτόχρονα, δίνει τη δυνατότητα για μεγαλύτερη εμβάθυνση των φυσικών εννοιών. Επιπλέον, η προσθήκη απωλειών λόγω υλικών ή/και ενός υποστρώματος ή ακόμα και μη σφαιρικών σκεδαστών είναι πολύ εύκολη, κάνοντας τη μέθοδο κατάλληλη για να περιγράψει ρεαλιστικά τα πειράματα.

Τα αποτελέσματά μας, για δισδιάστατα πλέγματα, που αποτελούνται από διηλεκτρικές σφαίρες υψηλού δείκτη διάθλασης, έδειξαν ότι εμφανίζονται φαινόμενα ισχυρής μη ελαστικής σκέδασης, για συχνότητες κάτω από το όριο περίθλασης. Συγκεκριμένα, η ύπαρξη γειτονικών συντονισμών υψηλής ποιότητας, που προέρχονται από τους συντονισμούς Mie των μεμονωμένων σφαιρών, οι οποίοι μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση με την κατάλληλη επιλογή των γεωμετρικών παραμέτρων, επιτρέπει την πραγματοποίηση οπτικών μεταβάσεων. Αυτές εκδηλώνονται ως ισχυρή μη ελαστική σκέδαση, όταν ικανοποιείται η συνθήκη του τριπλού συντονισμού και συνοδεύονται με έλλειψη της συμμετρίας αντιστροφής. Ο παραπάνω μηχανισμός οδηγεί σε ενισχυμένα φαινόμενα ακόμα και με μικρό πλάτος ταλάντωσης, το οποίο μπορεί να επιτευχθεί πειραματικά ακόμα και στο υπέρυθρο.

Γενικά, η κατανόηση των οπτικών ιδιοτήτων των συστημάτων που μεταβάλλονται χρονικά, έχει μεγάλες προοπτικές και μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία νέων πρωτότυπων συσκευών. Εκτός από τις άμεσες εφαρμογές, σχετικές με το σχεδιασμό φωτονικών κρυστάλλων και επιφανειών που επιτρέπουν μονοκατευθυντική διάδοση, όπως η δημιουργία οπτικών μονωτών και κυκλοφορητών με χρήση απλών διηλεκτρικών, ο έλεγχος των κυματικών φαινομένων με τη χρήση χωροχρονικών Floquet δομών ανοίγει το δρόμο για νέες ανακαλύψεις σχετικές με την αλληλεπίδραση ύλης-φωτός. Μια χρονική μεταβολή μπορεί να προκαλέσει την εμφάνιση απορρόφησης ή ενίσχυσης ακόμα και σε υλικά που δεν έχουν απώλειες, κάτι που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανακάλυψη νέων επαναστατικών μεθόδων σχετικές με την κυματοδήγηση, αποθήκευση και απορρόφηση του φωτός.

Βιβλιογραφία

[1] John D Joannopoulos, Steven G Johnson, Joshua N Winn, and Robert D Meade. *Molding the flow of light.* Princeton Univ. Press, Princeton, 2008.

[2] Nader Engheta and Richard W Ziolkowski. *Metamaterials: physics and engineering explorations.* John Wiley & Sons, 2006.

[3] CP Barrera-Patiño, JD Vollet-Filho, RG Teixeira-Rosa, HP Quiroz, A Dussan, NM Inada, VS Bagnato, and RR Rey-González. Photonic effects in natural nanostructures on morpho cypris and greta oto butterfly wings. *Scientific Reports*, 10(1):1–11, 2020.

[4] Amr M Shaltout, Vladimir M Shalaev, and Mark L Brongersma. Spatiotemporal light control with active metasurfaces. *Science*, 364(6441):eaat3100, 2019.

[5] Sajjad Taravati and Ahmed A Kishk. Space-time modulation: Principles and applications. *IEEE Microwave Magazine*, 21(4):30–56, 2020.

[6] Xuchen Wang, Grigorii Ptitcyn, VS Asadchy, A Díaz-Rubio, Mohammad Sajjad Mirmoosa, Shanhui Fan, and Sergei A Tretyakov. Nonreciprocity in bianisotropic systems with uniform time modulation. *Physical Review Letters*, 125(26):266102, 2020.

[7] Haotian Wu, Xin Xin Gao, Lei Zhang, Guo Dong Bai, Qiang Cheng, Lianlin Li, and Tie Jun Cui. Harmonic information transitions of spatiotemporal metasurfaces. *Light: science & applications*, 9(1):198, 2020.

[8] Nader Engheta. Metamaterials with high degrees of freedom: space, time, and more. *Nanophotonics*, 10(1):639–642, 2021.

[9] Emanuele Galiffi, Romain Tirole, Shixiong Yin, Huanan Li, Stefano Vezzoli, Paloma A Huidobro, Mário G Silveirinha, Riccardo Sapienza, Andrea Alù, and JB Pendry. Photonics of time-varying media. *Advanced Photonics*, 4(1):014002, 2022.

[10] Sajjad Taravati and George V Eleftheriades. Microwave space-time-modulated metasurfaces. *ACS Photonics*, 9(2):305–318, 2022.

[11] Mikael C Rechtsman, Julia M Zeuner, Yonatan Plotnik, Yaakov Lumer, Daniel Podolsky, Felix Dreisow, Stefan Nolte, Mordechai Segev, and Alexander Szameit. Photonic floquet topological insulators. *Nature*, 496(7444):196–200, 2013.

[12] Eran Lustig, Yonatan Sharabi, and Mordechai Segev. Topological aspects of photonic time crystals. *Optica*, 5(11):1390–1395, 2018.

[13] Krzysztof Giergiel, Alexandre Dauphin, Maciej Lewenstein, Jakub Zakrzewski, and Krzysztof Sacha. Topological time crystals. *New Journal of Physics*, 21(5):052003, 2019.

[14] Xiang Ni, Seunghwi Kim, and Andrea Alù. Topological insulator in two synthetic dimensions based on an optomechanical resonator. *Optica*, 8(8):1024–1032, 2021.

[15] Neng Wang, Zhao-Qing Zhang, and Che Ting Chan. Photonic floquet media with a complex time-periodic permittivity. *Physical Review B*, 98(8):085142, 2018.

[16] Nima Chamanara, Sajjad Taravati, Zoé-Lise Deck-Léger, and Christophe Caloz. Optical isolation based on space-time engineered asymmetric photonic band gaps. *Physical Review B*, 96(15):155409, 2017.

[17] Jacopo Marconi, Emanuele Riva, Matteo Di Ronco, Gabriele Cazzulani, Francesco Braghin, and Massimo Ruzzene. Experimental observation of nonreciprocal band gaps in a space-time-modulated beam using a shunted piezoelectric array. *Physical Review Applied*, 13(3):031001, 2020.

[18] Theodoros T Koutserimpas and Romain Fleury. Nonreciprocal gain in non-hermitian time-floquet systems. *Physical Review Letters*, 120(8):087401, 2018.

[19] Mengyao Li, Xiang Ni, Matthew Weiner, Andrea Alù, and Alexander B Khanikaev. Topological phases and nonreciprocal edge states in non-hermitian floquet insulators. *Physical Review B*, 100(4):045423, 2019.

[20] Kai Wang, Avik Dutt, Charles C Wojcik, and Shanhui Fan. Topological complex-energy braiding of non-hermitian bands. *Nature*, 598(7879):59–64, 2021.

[21] Zeki Hayran, Aobo Chen, and Francesco Monticone. Spectral causality and the scattering of waves. *Optica*, 8(8):1040–1049, 2021.

[22] Nicholas A Estep, Dimitrios L Sounas, Jason Soric, and Andrea Alu. Magnetic-free non-reciprocity and isolation based on parametrically modulated coupled-resonator loops. *Nature Physics*, 10(12):923–927, 2014.

[23] Amr Shaltout, Alexander Kildishev, and Vladimir Shalaev. Time-varying metasurfaces and lorentz non-reciprocity. *Optical Materials Express*, 5(11):2459–2467, 2015.

[24] Yakir Hadad, Dimitrios L Sounas, and Andrea Alu. Space-time gradient metasurfaces. *Physical Review B*, 92(10):100304, 2015.

[25] Christophe Caloz, Andrea Alu, Sergei Tretyakov, Dimitrios Sounas, Karim Achouri, and Zoé-Lise Deck-Léger. Electromagnetic nonreciprocity. *Physical Review Applied*, 10(4):047001, 2018.

[26] Ali Momeni and Romain Fleury. Electromagnetic wave-based extreme deep learning with nonlinear time-floquet entanglement. *Nature Communications*, 13(1):1–11, 2022.

[27] Carlos García-Meca, Andrés Macho Ortiz, and Roberto Llorente Sáez. Supersymmetry in the time domain and its applications in optics. *Nature Communications*, 11(1):1–8, 2020.

[28] DA Patient and SAR Horsley. Supersymmetry, half-bound states, and grazing incidence reflection. *Journal of Optics*, 23(7):075602, 2021.

[29] David Viedma, Verònica Ahufinger, and Jordi Mompart. Supersymmetry-enhanced stark-chirped rapid-adiabatic-passage in multimode optical waveguides. *Optics Express*, 29(24):39200–39213, 2021.

[30] Theodoros T Koutserimpas, Andrea Alù, and Romain Fleury. Parametric amplification and bidirectional invisibility in pt-symmetric time-floquet systems. *Physical Review A*, 97(1):013839, 2018.

[31] D Holberg and K Kunz. Parametric properties of fields in a slab of time-varying permittivity. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(2):183–194, 1966.

[32] Jorge R Zurita-Sánchez, P Halevi, and Juan C Cervantes-Gonzalez. Reflection and transmission of a wave incident on a slab with a time-periodic dielectric function (t). *Physical Review A*, 79(5):053821, 2009.

[33] Sajjad Taravati, Nima Chamanara, and Christophe Caloz. Nonreciprocal electromagnetic scattering from a periodically space-time modulated slab and application to a quasisonic isolator. *Physical Review B*, 96(16):165144, 2017.

[34] Huanan Li, Shixiong Yin, and Andrea Alù. Nonreciprocity and faraday rotation at time interfaces. *Physical Review Letters*, 128(17):173901, 2022.

[35] Fabio Biancalana, Andreas Amann, Alexander V Uskov, and Eoin P O'reilly. Dynamics of light propagation in spatiotemporal dielectric structures. *Physical Review E*, 75(4):046607, 2007.

[36] Lunwu Zeng, Jin Xu, Chengen Wang, Jianhua Zhang, Yuting Zhao, Jing Zeng, and Runxia Song. Photonic time crystals. *Scientific Reports*, 7(1):1–9, 2017.

[37] Andrei Rogov and Evgenii Narimanov. Space–time metamaterials. *ACS Photonics*, 5(7):2868–2877, 2018.

[38] José Gabriel Gaxiola-Luna and P Halevi. Temporal photonic (time) crystal with a square profile of both permittivity (t) and permeability μ (t). *Physical Review B*, 103(14):144306, 2021.

[39] Ioannis Stefanou, Petros Andreas Pantazopoulos, and Nikolaos Stefanou. Light scattering by a spherical particle with a time-periodic refractive index. *Journal of Optical Society of America B*, 38(2):407–414, 2021.

[40] G Ptitcyn, A Lamprianidis, T Karamanos, M Müller, R Alaee, VS Asadchy, MS Mirmoosa, M Albooyeh, S Fan, C Rockstuhl, et al. Scattering of light by spheres made from a time-modulated and dispersive material. In *2021 Fifteenth International Congress on Artificial Materials for Novel Wave Phenomena (Metamaterials)*, pages 347–349. IEEE, 2021.

[41] Kurt Schab, Bradley Shirley, and KC Kerby-Patel. Scattering properties of spherical time-varying conductive shells. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 70(8):7011–7023, 2022.

[42] V. Asadchy, A.G. Lamprianidis, G. Ptitcyn, M. Albooyeh, Rituraj, T. Karamanos, R. Alaee, S.A. Tretyakov, C. Rockstuhl, and S. Fan. Parametric mie resonances and directional amplification in time-modulated scatterers. *Physical Review Applied*, 18:054065, Nov 2022.

[43] Mingkai Liu, David A Powell, Yair Zarate, and Ilya V Shadrivov. Huygens' metadevices for parametric waves. *Physical Review X*, 8(3):031077, 2018.

[44] Nima Chamanara, Yousef Vahabzadeh, and Christophe Caloz. Simultaneous control of the spatial and temporal spectra of light with space-time varying metasurfaces. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 67(4):2430–2441, 2019.

[45] Nicholas Karl, Polina P Vabishchevich, Maxim R Shcherbakov, Sheng Liu, Michael B Sinclair, Gennady Shvets, and Igal Brener. Frequency conversion in a time-variant dielectric metasurface. *Nano Letters*, 20(10):7052–7058, 2020.

[46] Joshua N Winn, Shanhui Fan, John D Joannopoulos, and Erich P Ippen. Interband transitions in photonic crystals. *Physical Review B*, 59(3):1551, 1999.

[47] Po Dong, Stefan F Preble, Jacob T Robinson, Sasikanth Manipatruni, and Michal Lipson. Inducing photonic transitions between discrete modes in a silicon optical microcavity. *Physical Review Letters*, 100(3):033904, 2008.

[48] Zongfu Yu and Shanhui Fan. Complete optical isolation created by indirect interband photonic transitions. *Nature Photonics*, 3(2):91–94, 2009.

[49] Hugo Lira, Zongfu Yu, Shanhui Fan, and Michal Lipson. Electrically driven nonreciprocity induced by interband photonic transition on a silicon chip. *Physical Review Letters*, 109(3):033901, 2012.

[50] RICHARDA Soref and BRIANR Bennett. Electrooptical effects in silicon. *IEEE journal of quantum electronics*, 23(1):123–129, 1987.

[51] Brian Slovick, Zhi Gang Yu, Marcy Berding, and Srini Krishnamurthy. Perfect dielectric-metamaterial reflector. *Physical Review B*, 88(16):165116, 2013.

[52] Hadi K Shamkhi, Kseniia V Baryshnikova, Andrey Sayanskiy, Polina Kapitanova, Pavel D Terekhov, Pavel Belov, Alina Karabchevsky, Andrey B Evlyukhin, Yuri Kivshar, and Alexander S Shalin. Transverse scattering and generalized kerker effects in all-dielectric mie-resonant metaoptics. *Physical Review Letters*, 122(19):193905, 2019.

[53] Romain Dezert, Philippe Richetti, and Alexandre Baron. Complete multipolar description of reflection and transmission across a metasurface for perfect absorption of light. *Optics Express*, 27(19):26317–26330, 2019.

[54] E Panagiotidis, E Almpanis, N Stefanou, and N Papanikolaou. Multipolar interactions in si sphere metagratings. *Journal of Applied Physics*, 128(9):093103, 2020.

[55] Aso Rahimzadegan, Theodosios D Karamanos, Rasoul Alaee, Aristeidis G Lamprianidis, Dominik Beutel, Robert W Boyd, and Carsten Rockstuhl. A comprehensive multipolar theory for periodic metasurfaces. *Advanced Optical Materials*, 10(10):2102059, 2022.

[56] Viktoriia E Babicheva, Mihail I Petrov, Kseniia V Baryshnikova, and Pavel A Belov. Reflection compensation mediated by electric and magnetic resonances of all-dielectric metasurfaces. *Journal of Optical Society of America B*, 34(7):D18–D28, 2017.

[57] Jiaqi Li, Niels Verellen, and Pol Van Dorpe. Engineering electric and magnetic dipole coupling in arrays of dielectric nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 123(8):083101, 2018.

[58] N Stefanou, V Yannopapas, and A Modinos. Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients. *Computer Physics Communications*, 113(1):49–77, 1998.

[59] N Stefanou, V Yannopapas, and A Modinos. Multem 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals. *Computer Physics Communications*, 132(1-2):189–196, 2000.

[60] N Stefanou, V Karathanos, and A Modinos. Scattering of electromagnetic waves by periodic structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(36):7389, 1992.

[61] G Gantzounis and N Stefanou. Layer-multiple-scattering method for photonic crystals of nonspherical particles. *Physical Review B*, 73(3):035115, 2006.

[62] N. Stefanou, C. Tserkezis, and G. Gantzounis. Plasmonic excitations in ordered assemblies of metallic nanoshells. page 698910, Strasbourg, France, April 2008.

[63] I. E. Psarobas, N. Stefanou, and A. Modinos. Photonic crystals of chiral spheres. *Journal of the Optical Society of America A*, 16(2):343, February 1999.

[64] Aristi Christofi and Nikolaos Stefanou. Photonic structures of metal-coated chiral spheres. *Journal of the Optical Society of America B*, 29(6):1165, June 2012.

[65] A. Christofi and N. Stefanou. LAYER MULTIPLE SCATTERING CALCULATIONS FOR NONRECIPROCAL PHOTONIC STRUCTURES. *International Journal of Modern Physics B*, 28(02):1441012, January 2014.

[66] JM MacLaren, S Crampin, DD Vvedensky, RC Albers, and JB Pendry. Layer korringa-kohn-rostoker electronic structure code for bulk and interface geometries. *Computer Physics Communications*, 60(3):365–389, 1990.

[67] G Gantzounis and N Stefanou. Theoretical analysis of three-dimensional polaritonic photonic crystals. *Physical Review B*, 72(7):075107, 2005.

[68] E Almpanis and N Papanikolaou. Comparison of ag and si nanoparticle arrays: mimicking subwavelength plasmonic field concentrations with dielectric components. *Journal of Optical Society of America B*, 33(1):99–104, 2016.

[69] Evangelos Almpanis, Petros-Andreas Pantazopoulos, Nikolaos Papanikolaou, Vassilios Yannopapas, and Nikolaos Stefanou. Metal-nanoparticle arrays on a magnetic garnet film for tunable plasmon-enhanced faraday rotation. *Journal of Optical Society of America B*, 33(12):2609–2616, 2016.

[70] Evangelos Almpanis, Nikolaos Papanikolaou, and Nikolaos Stefanou. Breakdown of the linear acousto-optic interaction regime in phoxonic cavities. *Optics Express*, 22(26):31595–31607, 2014.

[71] E Panagiotidis, E Almpanis, N Papanikolaou, and N Stefanou. Inelastic light scattering from a dielectric sphere with a time-varying radius. *Physical Review A*, 106(1):013524, 2022.

[72] Xiaohui Zhu, Junfei Li, Chen Shen, Xiuyuan Peng, Ailing Song, Longqiu Li, and Steven A Cummer. Non-reciprocal acoustic transmission via space-time modulated membranes. *Applied Physics Letters*, 116(3):034101, 2020.

[73] Sheng Wan, Liyun Cao, Yifan Zhu, Mourad Oudich, and Badreddine Assouar. Nonreciprocal sound propagation via cascaded time-modulated slab resonators. *Physical Review Applied*, 16(6):064061, 2021.

[74] Ya-Wen Tsai, Yao-Ting Wang, Emanuele Galiffi, Andrea Alù, and Ta-Jen Yen. Surface-wave coupling in double floquet sheets supporting phased temporal wood anomalies. *Nanophotonics*, 11(15):3509–3517, 2022.

Κεφάλαιο 5

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Παράρτημα Α΄

Συναρτήσεις Bessel και Hankel

Η μορφή των λύσεων της εξίσωσης Laplace για βαθμωτά πεδία, δηλαδή της $\nabla^2 F(\mathbf{r}) = 0$, σε κυλινδρικές συντεταγμένες έχει τη μορφή $F(\mathbf{r}) = F_\nu(x)\exp(\pm qz + \mathrm{i}\nu\phi)$, με $\mathbf{r} = (\rho, \phi, z)$ το διάνυσμα της θέσης σε κυλινδρικές συντεταγμένες και $x = q\rho$. Η $F_\nu(x)$ είναι το ακτινικό μέρος της λύσης και δίνεται μέσω της εξίσωσης Bessel

$$F''_\nu(x) + \frac{1}{x}F'_\nu(x) + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right)F_\nu(x) = 0. \tag{Α΄.1}$$

Η Εξ. (Α΄.1) αποτελεί διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης και για κάθε ν έχει δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις. Αυτές οι δύο λύσεις εξαρτώνται με το αν το ν είναι ακέραιος ή όχι. Στην περίπτωση που δεν είναι τότε οι λύσεις είναι οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους με τάξη $\pm\nu$

$$\begin{aligned} J_\nu(x) &= \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!\Gamma(s+\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2s} \\ J_{-\nu}(x) &= \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!\Gamma(s-\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2s}. \end{aligned} \tag{Α΄.2}$$

Στην περίπτωση που το ν είναι ακέραιος η πρώτη λύση είναι της μορφής

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) \tag{Α΄.3}$$

ενώ η δεύτερη είναι συνάρτηση Bessel δεύτερου είδους

$$N_\nu(x) = \frac{J_\nu(x)\cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)} \tag{A$'$.4}$$

η οποία υπολογίζεται οριακά για $\nu \to n$. Η μόνες λύσεις (της Εξ. (Α$'$.1)) από όλες τις παραπάνω που αναφέρθηκαν, οι οποίες δεν απειρίζονται για $x = 0$ είναι η συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους.

Επίσης, πρέπει να αν αναφερθεί ότι οι Bessel ικανοποιούν τις παρακάτω αναγωγικές σχέσεις

$$\begin{aligned} F_{\nu-1}(x) + F_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x}F_\nu(x) \\ F_{\nu-1}(x) - F_{\nu+1}(x) &= 2F'_\nu(x). \end{aligned} \tag{A$'$.5}$$

Επιπλέον είναι δυνατόν να γίνει ο υπολογισμός των Bessel πρώτου είδους και μέσω των ολοκληρωτικών σχέσεων

$$\begin{aligned} J_\nu(x) &= \frac{1}{\pi}\int_0^\pi d\phi \cos(x\sin\phi - \nu\phi) \\ &= \frac{1}{\pi \mathrm{i}^\nu}\int_0^\pi d\phi e^{(\mathrm{i}x\cos\phi)}\cos(\nu\phi) \\ &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}^\nu}\int_0^{2\pi} d\phi e^{\mathrm{i}(z\cos\phi + \nu\phi)}. \end{aligned} \tag{A$'$.6}$$

Επίσης ισχύουν και οι εξής αθροιστικές ταυτότητες

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(x) &= 1 \\ e^{(\mathrm{i}x\cos\phi)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^n J_n(x) e^{(\mathrm{i}n\phi)}&. \end{aligned} \tag{A$'$.7}$$

Θα αναφερθούμε τώρα στην εξίσωση Helmholtz για βαθμωτά πεδία, η οποία είναι η $\nabla^2 F(\mathbf{r}) + q^2 F(\mathbf{r}) = 0$. Η λύσεις αυτής έχουν τη μορφή $F(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} f_\ell(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$, όπου $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ οι σφαιρικές αρμονικές, ενώ το $\hat{\mathbf{r}}$ περιέχει την εξάρτηση από τις γωνίες θ, ϕ του διανύσματος $\mathbf{r}$ στις σφαιρικές συντεταγμένες. Επίσης το $f_\ell(qr)$ είναι το ακτινικό μέρος της λύσης και ικανοποιεί την εξίσωση

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + q^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] f_\ell(qr) = 0 \tag{A$'$.8}$$

η οποία μπορει να γραφεί ως

$$f_\ell''(x) + \frac{2}{x} f_\ell'(x) + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right] f_\ell(x) = 0, x = qr, \tag{Α΄.9}$$

αφού γραφτεί ο τελεστής ∇^2 σε σφαιρικές συντεταγμένες. Η παραπάνω εξίσωση επιδέχεται δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις για δεδομένο ℓ. Τέτοιες είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel, Neumann, Hankel πρώτου ή δεύτερου είδους, οι οποίες δίνονται, αντίστοιχα, από τις παρακάτω σχέσεις

$$\begin{aligned}
j_\ell(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+1/2}(x) = (2x)^\ell \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+\ell)!}{s!(2s+2\ell+1)!} x^{2s} \\
n_\ell(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{\ell+1/2}(x) = 2(-2x)^{-\ell-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-\ell)!}{s!(2s-2\ell)!} x^{2s} \\
h_\ell^+(x) &= j_\ell(x) + \mathrm{i} n_\ell(x) \\
h_\ell^-(x) &= j_\ell(x) - \mathrm{i} n_\ell(x).
\end{aligned} \tag{Α΄.10}$$

Παρόμοια με προηγουμένως οι μόνες συναρτήσεις από τις παραπάνω, οι οποίες δε μηδενίζονται στη θέση $x = 0$ είναι οι Bessel. Ισχύουν και εδώ οι παρακάτω αναγωγικές σχέσεις

$$\begin{aligned}
x f_\ell'(x) &= \ell f_\ell(x) - x f_{\ell+1}(x) \\
(2\ell+1) f_\ell(x) &= x f_{\ell-1}(x) + x f_{\ell+1}(x) \\
x f_{\ell-1}(x) &= x f_\ell'(x) + (\ell+1) f_\ell(x) \\
(2\ell+1) f_\ell'(x) &= \ell f_{\ell-1}(x) - (\ell+1) f_{\ell+1}(x).
\end{aligned} \tag{Α΄.11}$$

Επίσης αξίζει να δοθεί και η σχέση της ορίζουσας Wronski

$$\begin{vmatrix} j_\ell(x) & n_\ell(x) \\ j_\ell'(x) & n_\ell'(x) \end{vmatrix} = \frac{1}{x^2}. \tag{Α΄.12}$$

Τέλος θα αναφέρουμε τη συμπεριφορά των λύσεων που αναφέρθηκαν για δύο ειδικές περιπτώσεις.

Αρχικά στην περίπτωση που $x \gg 1$ ισχύει

$$
\begin{aligned}
j_\ell(x \gg 1) &\sim \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right)\\
n_\ell(x \gg 1) &\sim -\frac{1}{x}\cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right)\\
h_\ell^{+}(x \gg 1) &\sim (-\mathrm{i})^{\ell+1}\frac{e^{\mathrm{i}x}}{x}\\
h_\ell^{-}(x \gg 1) &\sim \mathrm{i}^{\ell+1}\frac{e^{-\mathrm{i}x}}{x}
\end{aligned}
\tag{A′.13}
$$

ενώ για $x \ll 1)$ ισχύει

$$
\begin{aligned}
j_\ell(x \ll 1) &\sim \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!}\\
n_\ell(x \ll 1) &\sim -\frac{(2\ell-1)!}{x^{\ell+1}}.
\end{aligned}
\tag{A′.14}
$$

Παράρτημα Β΄

Οι σφαιρικές Αρμονικές

Στο Παράρτημα Α΄ αναφερθήκαμε στο ακτινικό μέρος των λύσεων της εξίσωσης Helmholtz. Το γωνιακό μέρος των λύσεων είναι οι σφαιρικές αρμονικές που συμβολίζονται με $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ και ικανοποιούν την παρακάτω διαφορική εξίσωση

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

όπου $\mathbf{L}$ είναι ο τελεστής της στροφορμής. Στο μοναδιαίο $\hat{\mathbf{r}}$ συμπεριλαμβάνεται η εξάρτηση από τις γωνίες θ, ϕ του διανύσματος $\mathbf{r}$ σε σφαιρικές συντεταγμένες. Οι σφαιρικές αρμονικές είναι οι εξής

$$Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{\mathrm{i}m\phi}, \tag{B΄.2}$$

όπου $\ell = 0, 1, 2, \cdots, m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell$ και τα $P_\ell^m(\cos\theta)$ είναι τα προσαρτημένα πολυώνυμα Legendre που δίνονται από την παρακάτω σχέση

$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\left(1-x^2\right)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}\left(x^2-1\right)^\ell, \quad x = \cos\theta, \text{για} \quad m > 0. \tag{B΄.3}$$

Στην περίπτωση που $m < 0$ ισχύει

$$P_\ell^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(x) \tag{B′.4}$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει ότι

$$Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{B′.5}$$

και

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(-\hat{\mathbf{r}}) &= (-1)^\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ Y_{\ell m}(\theta=0,\phi) &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}. \end{aligned} \tag{B′.6}$$

Οι σφαιρικές αρμονικές $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ ικανοποιούν τις εξής σχέσεις ορθογωνιότητας και πληρότητας

$$\begin{aligned} &\int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \\ &\sum_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^*\left(\hat{\mathbf{r}}'\right) = \delta\left(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'\right) \end{aligned} \tag{B′.7}$$

και ταυτόχρονα ισχύει και το θεώρημα άθροισης

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})|^2 = \frac{2\ell+1}{4\pi}. \tag{B′.8}$$

Επιπλέον υπάρχουν και οι ακόλουθες σχέσεις, οι οποίες συνδέουν σφαιρικές αρμονικές διάφορων τάξεων

$$\begin{aligned} \cos\theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \zeta_{\ell+1}^m Y_{\ell+1 m}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_\ell^m Y_{\ell-1 m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ e^{\mathrm{i}\phi}\sin\theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= 2\left(\gamma_\ell^{-m} Y_{\ell-1 m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell+1}^{m+1} Y_{\ell+1 m+1}(\hat{\mathbf{r}})\right) \\ e^{-\mathrm{i}\phi}\sin\theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= 2\left(\gamma_{\ell+1}^{-m+1} Y_{\ell+1 m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_\ell^m Y_{\ell-1 m-1}(\hat{\mathbf{r}})\right) \\ m\cot\theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= -\left[\alpha_\ell^m e^{-\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) + \alpha_\ell^{-m} e^{\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}})\right], \end{aligned} \tag{B′.9}$$

ενώ ισχύουν και οι

$$\begin{aligned}\frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \theta} &= \alpha_\ell^m e^{-\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \alpha_\ell^{-m} e^{\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= \mathrm{i}\psi_\ell X_{\ell m,\phi}(\hat{\mathbf{r}}) \\ \frac{\partial Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \phi} &= \mathrm{i} m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= -\mathrm{i}\psi_\ell \sin\theta X_{\ell m,\theta}(\hat{\mathbf{r}}).\end{aligned} \tag{B$'$.10}$$

Επιπλέον ισχύει και η παρακάτω σχέση

$$\begin{aligned}\nabla\left[f_\ell(qr)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] &= f_\ell(qr)\nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + q f_\ell'(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} \\ &= \mathrm{i}\psi_\ell \frac{f_\ell(qr)}{r}\left(X_{\ell m,\phi}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\theta}} - X_{\ell m,\theta}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\phi}}\right) \\ &+ q f_\ell'(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}}\end{aligned} \tag{B$'$.11}$$

.

Στη συνέχεια θα ασχοληθούμε με τις διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές.

Αυτές συμβολίζονται με $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ και ορίζονται από την σχέση

$$\psi_\ell \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \mathbf{L} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \equiv -\mathrm{i}\mathbf{r}\times\nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{B$'$.12}$$

όπου $\psi_\ell = \sqrt{\ell(\ell+1)}$.

Τα r, θ, ϕ αντιστοιχούν στα μοναδιαία διανύσματα και στις αντίστοιχες συνιστώσες στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων. Εξ' ορισμού $\mathbf{X}_{00}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$ και στην περίπτωση που $\ell \geq 1$

$$\begin{aligned}\psi_\ell \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \Big[\alpha_\ell^{-m}\cos\theta e^{\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - m\sin\theta Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &+\alpha_\ell^m \cos\theta e^{-\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}})\Big]\hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &+\mathrm{i}\left[\alpha_\ell^{-m} e^{\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \alpha_\ell^m e^{-\mathrm{i}\phi} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}})\right]\hat{\boldsymbol{\phi}} \\ &= \alpha_\ell^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}})\left(\hat{\mathbf{e}}_x + \mathrm{i}_y\right) + m Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{e}}_z \\ &+ \alpha_\ell^m Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}})\left(\hat{\mathbf{e}}_x - \mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y\right).\end{aligned} \tag{B$'$.13}$$

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

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\mathrm{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell{+}1)Y_{\ell m}$ και $\mathbf{L}^2\mathbf{L} = \mathbf{L}\mathbf{L}^2$ καταλήγουμε ότι $\mathbf{L}^2\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \ell(\ell+1)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$.

Από την (B′.12) προκύπτει

$$\mathbf{X}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^{m+1}\mathbf{X}_{\ell -m}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{B′.14}$$

και

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} = X_{\ell m,\phi}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\theta}} - X_{\ell m,\theta}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\phi}} = \frac{-\mathrm{i}r\nabla Y_{\ell m}}{\psi_\ell} \tag{B′.15}$$

καθώς και

$$\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}). \tag{B′.16}$$

Στη συνέχεια παρατίθενται κάποιες πολύ σημαντικές σχέσεις που περιγράφουν τη δράση των τελεστών $\nabla\times$ και $\nabla\cdot$ στις $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{r}\left[\mathrm{i}\psi_\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - X_{\ell m,\phi}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\theta}} + X_{\ell m,\theta}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\boldsymbol{\phi}}\right] \\ &= \frac{1}{r}\left[\mathrm{i}\psi_\ell Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}\right] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\psi_\ell}\left[\frac{\psi_\ell^2}{r} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} + \nabla Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] \end{aligned} \tag{B′.17}$$

και

$$\nabla \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = 0. \tag{B′.18}$$

Αν λάβουμε υπόψη τις Σχέσεις (B′.17),(B′.18) προκύπτουν και οι εξής σχέσεις

$$\begin{aligned} &\nabla \times f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = q\left\{\mathrm{i}\psi_\ell \frac{f_\ell(x)}{x} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \left[f'_\ell(x) + \frac{f_\ell(x)}{x}\right]\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \times \hat{\mathbf{r}}\right\} \\ &\nabla \cdot \left[f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] = 0 \\ &\nabla^2\left[f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] = -\nabla \times \left[\nabla \times f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] = -q^2 f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \tag{B′.19}$$

όπου $x = qr$. Για να εξάγουμε την τελευταία σχέση χρησιμοποιήσαμε ότι

$$\begin{aligned} \nabla\left\{\nabla \cdot \left[f_\ell(x)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right]\right\} &= \nabla\left[\nabla f_\ell(x) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + f_\ell(x)\nabla \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] \\ &= \nabla\left[\nabla f_\ell(x) \cdot \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})\right] = 0. \end{aligned} \tag{B′.20}$$

Επίσης οι $\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$ ικανοποιούν τις παρακάτω σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\begin{aligned} &\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{X}^*_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \\ &\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot [\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}})] = 0, \end{aligned} \tag{B$'$.21}$$

με τη βοήθεια των οποίων καταλήγουμε στη παρακάτω σχέση

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell m} \left\{ \mathcal{A}^{(1)}_{\ell m}(r) \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) + \mathcal{A}^{(2)}_{\ell m}(r) \left[\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \right\} = 0 \\ \Rightarrow \quad &\mathcal{A}^{(1)}_{\ell m}(r) = 0 = \mathcal{A}^{(2)}_{\ell m}(r). \end{aligned} \tag{B$'$.22}$$

Επιπλέον, αποδεικνύεται ότι

$$\int d\Omega \mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \nabla \times [f(r) \mathbf{X}^*_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}})] = 0, \tag{B$'$.23}$$

και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (B$'$.7) και (B$'$.13) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \mathbf{X}^*_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{\delta_{\ell\ell'}}{\psi_\ell} \Big[&\delta_{m+1m'} \alpha^{-m'}_{\ell'} \left(\hat{\mathbf{e}}_x - \mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y \right) \\ &+ \delta_{mm'} m \hat{\mathbf{e}}_z + \delta_{m-1m'} \alpha^{m'}_{\ell'} \left(\hat{\mathbf{e}}_x + \mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y \right) \Big] \end{aligned} \tag{B$'$.24}$$

και

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y^*_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} = &\,\delta_{m+1m'} \left(-\gamma^{m+1}_{\ell+1} \delta_{\ell+1\ell'} + \gamma^{-m}_{\ell} \delta_{\ell-1\ell'} \right) \left(\hat{\mathbf{e}}_x - \mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y \right) \\ &+ \delta_{m-1m'} \left(\gamma^{-m+1}_{\ell+1} \delta_{\ell+1\ell'} - \gamma^{m}_{\ell} \delta_{\ell-1\ell'} \right) \left(\hat{\mathbf{e}}_x + \mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y \right) \\ &+ \delta_{mm'} \left(\zeta^{m}_{\ell+1} \delta_{\ell+1\ell'} + \zeta^{m}_{\ell} \delta_{\ell-1\ell'} \right) \hat{\mathbf{e}}_z, \end{aligned} \tag{B$'$.25}$$

όπου $\gamma^m_\ell = \frac{[(\ell+m)(\ell+m-1)]^{1/2}}{2[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}$ και $\zeta^m_\ell = \frac{[(\ell+m)(\ell-m)]^{1/2}}{[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}$.

Παράρτημα Γ′

Αλλαγή βάσης κυμάτων

Στο παράτημα αυτό παρατίθεται η απόδειξη της σχέσης

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{\left(i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n\right)} h_{\ell}^{+}\left(qr_n\right) Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{r}}_n\right) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi(-\mathrm{i})^{\ell}}{qA_0 K_{\mathbf{g};z}^{+}} Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{K}}_{\mathbf{g}}^{s}\right) e^{\left(\mathbf{i}\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^{s}\cdot\mathbf{r}\right)}. \tag{Γ′.1}$$

Τα σύμβολα της παραπάνω σχέσης ορίζονται στο κυρίως κείμενο στο Κεφ.1. Για το λόγο αυτό αρχικά θα αναφερθούμε στη συνάρτηση Green για την εξίσωση Helmholtz για τα βαθμωτά πεδία, $\left(\nabla^2 + q^2\right) F(\mathbf{r}) = 0$. Η συνάρτηση Green στη φασματική αναπαράσταση της παίρνει τη μορφή

$$g\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa\right) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{\mathbf{i}\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\kappa + \mathrm{i}\varepsilon)^2 - q^2}. \tag{Γ′.2}$$

Στον συνεχή χώρο των q η σχέση γράφεται

$$\begin{aligned}
g\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa\right) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon\to 0} \int d^3q \frac{e^{\mathbf{i}\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\kappa + \mathrm{i}\varepsilon)^2 - q^2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon\to 0} \int d^2q_{\parallel} \int dq_z \frac{e^{\mathbf{i}\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\kappa + \mathrm{i}\varepsilon)^2 - q_{\parallel}^2 - q_z^2} \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\varepsilon\to 0} \int d^2q_{\parallel} \frac{e^{\mathbf{i}\mathbf{q}_{\parallel}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')_{\parallel}}}{2\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \int dq_z e^{\mathrm{i}q_z(z-z')} \\
&\times \left[\frac{1}{q_z - \sqrt{(\kappa + \mathrm{i}\varepsilon)^2 - q_{\parallel}^2}} - \frac{1}{q_z + \sqrt{(\kappa + \mathrm{i}\varepsilon)^2 - q_{\parallel}^2}}\right],
\end{aligned} \tag{Γ′.3}$$

όπου ο δείκτης $\|$ δηλώνει τη xy συνιστώσα του διανύσματος. Χρησιμοποιώντας το λήμμα του Jordan, υπολογίζουμε τα δύο ολοκληρώματα στην αγκύλη και τελικά καταλήγουμε

$$g\left(\mathbf{r},\mathbf{r}';\kappa\right) = \frac{\mathrm{i}}{2(2\pi)^2}\int d^2 q_{\|} \frac{e^{\mathrm{i}\mathbf{q}_{\pm}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\|}^2}}, \tag{Γ′.4}$$

με

$$\mathbf{q}_{\pm} = \mathbf{q}_{\|} \pm \sqrt{\kappa^2 - q_{\|}^2}\hat{\mathbf{e}}_z, \quad +(-)\text{για} z - z' > 0 (< 0). \tag{Γ′.5}$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι η επιλογή των $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ είναι αυθαίρετη. Εμείς επιλέγουμε το $\mathbf{r}'$ στο επίπεδο xy, έτσι ώστε η εξίσωση (Γ′.5) να ισχύει για τη σύμβαση $+(-)$ για $z > (<) 0$.

Μια μαθηματική ταυτότητα χρήσιμη για την έκφραση των εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων γύρω από μια θέση $\mathbf{R_{n'}}$ ως εισερχόμενα σε μια άλλη θέση $\mathbf{R_n}$ είναι η

$$e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} \mathrm{i}^{\ell} j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^{k}(\hat{\mathbf{q}}). \tag{Γ′.6}$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις (Γ′.6) και (Β′.6) η (Γ′.4) γράφεται

$$g\left(\mathbf{r},\mathbf{r}';\kappa\right) = \frac{1}{2\pi}\sum_{\ell m} (-\mathrm{i})^{\ell+1} j_{\ell}\left(\kappa r'\right) Y_{\ell m}^{*}\left(\hat{\mathbf{r}}'\right) \int d^2 q_{\|} \frac{e^{(\mathrm{i}\mathbf{q}_{\pm}\cdot\mathbf{r})}}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\|}^2}} Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{q}}_{\pm}\right). \tag{Γ′.7}$$

Η συνάρτηση Green για $r' > r$ δίνεται από την έκφραση

$$g\left(\mathbf{r},\mathbf{r}';\kappa\right) = -\frac{e^{\mathrm{i}\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|} = -\mathrm{i}\kappa \sum_{\ell m} j_{\ell}\left(\kappa r'\right) h_{\ell}^{+}(\kappa r) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell m}^{*}\left(\hat{\mathbf{r}}'\right). \tag{Γ′.8}$$

Αν λάβουμε υπόψη την ορθογωνιότητα των σφαιρικών αρμονικών και συγκρίνουμε τις τελευταίες δύο σχέσεις προκύπτει

$$h_{\ell}^{+}(\kappa r) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{(-\mathrm{i})^{\ell}}{2\pi\kappa} \int d^2 q_{\|} \frac{e^{(\mathrm{i}\mathbf{q}_{\pm}\cdot\mathbf{r})}}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\|}^2}} Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{q}}_{\pm}\right), \tag{Γ′.9}$$

και για $\mathbf{r} \to \mathbf{r}_n$ ισχύει

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{\left(\mathrm{i}\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{R}_n\right)} h_\ell^+\left(\kappa r_n\right) Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{r}}_n\right) = \frac{(-\mathrm{i})^\ell}{2\pi\kappa}\int d^2 q_\parallel \frac{Y_{\ell m}\left(\hat{\mathbf{q}}_\pm\right)}{\sqrt{\kappa^2 - q_\parallel^2}} \times \sum_{\mathbf{R}_n} e^{\mathrm{i}\left(\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{R}_n+\mathbf{q}_\pm\cdot\mathbf{r}_n\right)}. \tag{Γ'.10}$$

Επειδή $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$ με $\mathbf{R}_n$ να είναι στο επίπεδο xy και χρησιμοποιώντας τη σχέση (Γ'.5) προκύπτει

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{\mathrm{i}\left(\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{R}_n+\mathbf{q}_\pm\cdot\mathbf{r}_n\right)} = e^{\left(\mathbf{i}_\pm\cdot\mathbf{r}\right)}\sum_{\mathbf{R}_n} e^{\mathrm{i}\left(\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}_\parallel\right)\cdot\mathbf{R}_n}, \tag{Γ'.11}$$

ενώ λαμβάνοντας υπόψη τη

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{\mathrm{i}\left(\mathbf{k}_\parallel-\mathbf{q}_\parallel\right)\cdot\mathbf{R}_n} = \frac{(2\pi)^2}{A_0}\sum_{\mathbf{g}}\delta\left(\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{q}_\parallel + \mathbf{g}\right), \tag{Γ'.12}$$

και τις (Γ'.10) και (Γ'.11) προκύπτει η αρχική σχέση (Γ'.1) που θέλαμε να αποδείξουμε. Μένει να αποδειχτεί η σχέση (Γ'.12). Με δεδομένη τη σχέση

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{(\mathrm{ik}\cdot\mathbf{R}_n)} = \begin{cases} N, & \mathbf{k} = \mathbf{g} \\ 0, & \mathbf{k} \neq \mathbf{g} \end{cases} = N\sum_{\mathbf{g}}\delta_{\mathrm{kg}}, \tag{Γ'.13}$$

με k : διακριτό, όπου τα $\mathbf{R}_n$ και $\mathbf{g}$, τα διανύσματα του ευθέως και του αντιστρόφου πλέγματος, αντίστοιχα, δ_{kg} το δέλτα του Kronecker και N το πλήθος των πλεγματικών σημείων. Επομένως ισχύει

$$\sum_{\mathrm{k}}\delta_{\mathrm{kg}} = 1 \tag{Γ'.14}$$

. Παίρνοντας το χώρο των k συνεχή, η σχέση (Γ'.14) γράφεται

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\left(\delta_{\mathbf{kg}}\right) = 1. \tag{Γ'.15}$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι

$$\int d^3k\,\delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) = 1, \tag{Γ'.16}$$

παίρνουμε τελικά

$$(\delta_{\mathrm{kg}}) = \frac{(2\pi)^3}{V}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{g}). \tag{Γ'.17}$$

Χρησιμοποιώντας ότι $V = NV_0$, με V_0 τον όγκο της θεμελιώδους κυψελίδας η Σχέση (Γ'.13), τελικά, παίρνει τη μορφή

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{(\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n)} = \frac{(2\pi)^3}{V_0}\sum_{\mathbf{g}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{g}). \tag{Γ'.18}$$

Η απόδειξη που παρουσιάστηκε αναφέρεται σε ένα 3D σύστημα. Στις δύο διαστάσεις, μπορεί κάποιος να πάρει τη ζητούμενη σχέση, με την αντιστοίχηση $\mathrm{k} \to \mathrm{k}_{\|} - \mathrm{q}\|$.

Παράρτημα Δ′

Αλλαγή κέντρου σκέδασης και σταθερές δομής

Σε αυτή την παράγραφο θα κάνουμε μια μαθηματική εισαγωγή για το πώς μπορούμε να γράψουμε τις αναπτύξεις των κυμάτων γύρω από διαφορετικές θέσεις του χώρου (ομοιογενούς μέσου). Αυτή η μαθηματική εργασία, αν και κοπιώδης, θα μας φανεί χρήσιμη στη συνέχεια, όταν στις θέσεις αυτές του χώρου προσθέσουμε σκεδαστές για να περιγράψουμε την πολλαπλή σκέδαση. Για να εκφράσουμε λοιπόν τα εξερχόμενα σφαιρικά κύματα γύρω από μια θέση $\mathbf{R}_{n'}$ ως εισερχόμενα σε μια άλλη θέση $\mathbf{R}_n$ χρησιμοποιούμε τις μαθηματικές ταυτότητες [1]

$$e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell m} \mathrm{i}^{\ell} j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y^{*}_{\ell m}(\hat{\mathbf{q}}) \ , \tag{Δ′.1}$$

$$\frac{e^{\mathrm{i}q\mathbf{r}-\mathbf{r}'}}{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} = 4\pi \mathrm{i} q \sum_{\ell m} j_{\ell}(qr_{<}) h^{+}_{\ell}(qr_{>}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y^{*}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}'}) \ , \tag{Δ′.2}$$

από τις οποίες προκύπτει [2]

$$h^{+}_{\ell'}(qr_{n'}) Y_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{r}_{n'}}) = \sum_{\ell m} G_{\ell' m';\ell m}(\mathbf{R}_{nn'}; q) j_{\ell}(qr_n) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}_n}) \quad (r_n < R_{nn'}) \ , \tag{Δ′.3}$$

[1] G. B. Arfken and H. J. Weber, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press, International edition, 1995).

[2] F. S. Ham and B. Segall, "Energy Bands in Periodic Lattices-Green's Function Method," Phys. Rev. 124, 1786 (1961).

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

$$G_{\ell m;\ell' m'}(\mathbf{R}_{nn'};q) = 4\pi \sum_{\ell'' m''} (-1)^{(\ell-\ell'-\ell'')/2} (-1)^{m'+m''} B_{\ell m}(\ell'' m'';\ell' m') \times h^{+}_{\ell''}(qR_{nn'}) Y_{\ell'' -m''}(\hat{\mathbf{R}_{nn'}}) \,, \tag{Δ'.4}$$

με

$$B_{\ell m}(\ell'' m'';\ell' m') = \int d\Omega \; Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell' -m'}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell'' m''}(\hat{\mathbf{r}}) \,. \tag{Δ'.5}$$

Τελικά, αντίστοιχες σχέσεις ισχύουν και για τα εξερχόμενα διανυσματικά σφαιρικά κύματα

$$\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_{\mathrm{L}} \Omega^{nn'}_{\mathrm{LL}'} \mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) \tag{Δ'.6}$$

όπου τα στοιχεία του πίνακα Ω υπολογίζονται στο παρόν Παράρτημα. Στη συνέχεια θα γίνει ο υπολογισμός του πίνακα Ω που τα στοιχεία του είναι οι σταθερές δομής. Από τη σχέση (1.22), η οποία συνδέει δύο εγκάρσια κύματα σφαιρικά κύματα, μπορούμε αν δράσουμε τον τελεστή $(\mathrm{i}/q)\nabla\times$ στη (Δ'.6) για $P = H$ να τη συγκρίνουμε με την αντίστοιχη $P = E$ και να συμπεράνουμε ότι $\Omega^{nn'}_{E\ell m;E\ell' m'} = \Omega^{nn'}_{H\ell m;H\ell' m'}$ και $\Omega^{nn'}_{E\ell m;H\ell' m'} = -\Omega^{nn'}_{H\ell m;E\ell' m'}$. Άρα, θα χρειαστεί να υπολογιστούν μόνο τα $\Omega^{nn'}_{H\ell m;H\ell' m'}, \Omega^{nn'}_{E\ell m;H\ell' m'}$. Εύκολα φαίνεται ότι

$$\Omega^{nn'}_{H\ell m;H\ell' m'} = \frac{\int d\Omega_{\hat{\mathbf{r}}_n} \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}^{*}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n)}{j_\ell(qr_n)} \tag{Δ'.7}$$

και χρησιμοποιώντας τις (B'.19) και (B'.21)έχουμε ότι

$$\Omega^{nn'}_{E\ell m;H\ell' m'} = -\frac{qr_n \int d\Omega_{\hat{\mathbf{r}}_n} \mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_n Y^{*}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_n)}{\psi_\ell j_\ell(qr_n)}. \tag{Δ'.8}$$

Στη συνέχεια θα αναπτύξουμε το κύμα $\mathbf{H}_{H\ell' m'}(\mathbf{r}_{n'})$, το οποίο είναι εξερχόμενο από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$ σε βαθμωτά εισερχόμενα κύματα ως προς τις υπόλοιπες θέσεις $\mathbf{R}_n$. Λαμβάνοντας υπόψη τις (Β′.13) και (Δ′.3) προκύπτει ότι

$$\mathbf{H}_{E\ell'm'}\left(\mathbf{r}_{n'}\right)=\frac{1}{\psi_{\ell'}}\sum_{\ell''m''}\Big[\alpha_{\ell'}^{-m'}G_{\ell'm'-1;\ell''m''}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\left(\hat{\mathbf{e}}_x+\mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y\right)+m'G_{\ell'm';\ell''m''}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\hat{\mathbf{e}}_z$$
$$+\alpha_{\ell'}^{m'}G_{\ell'm'+1;\ell''m''}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\left(\hat{\mathbf{e}}_x-\mathrm{i}\hat{\mathbf{e}}_y\right)\Big]j_{\ell''}\left(qr_n\right)Y_{\ell''m''}\left(\hat{\mathbf{r}}_n\right), \tag{Δ′.9}$$

όπου το α_ℓ^m δίνεται από τη Σχ.(1.30). Συνδυάζοντας τις σχέσεις (Δ′.7) και (Δ′.9) προκύπτει

$$\Omega_{H\ell m;H\ell'm'}^{nn'}=\Omega_{E\ell m;E\ell'm'}^{nn'}=\frac{1}{\psi_\ell\psi_{\ell'}}\Big[2\alpha_\ell^{-m}\alpha_{\ell'}^{-m'}G_{\ell'm'-1;\ell m-1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)$$
$$+mm'G_{\ell'm';\ell m}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)+2\alpha_\ell^m\alpha_{\ell'}^{m'}G_{\ell'm'+1;\ell m+1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\Big]. \tag{Δ′.10}$$

Χρησιμοποιώντας τις (Δ′.9) και (Β′.25) στην (Δ′.8) έχουμε

$$\Omega_{E\ell m;H\ell'm'}^{nn'}=-\frac{1}{\psi_\ell\psi_{\ell'}}\frac{qr_n}{j_\ell\left(qr_n\right)}\Big[j_{\ell+1}\left(qr_n\right)\mathcal{F}_{\ell'm';\ell m}^{+}+j_{\ell-1}\left(qr_n\right)\mathcal{F}_{\ell'm';\ell m}^{-}\Big], \tag{Δ′.11}$$

με

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^{+}&=2\alpha_\ell^{-m}\gamma_{\ell'+1}^{-m'+1}G_{\ell m-1;\ell'+1m'-1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)+m\zeta_{\ell'+1}^{m'}G_{\ell m;\ell'+1m'}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\\&-2\alpha_\ell^m\gamma_{\ell'+1}^{m'+1}G_{\ell m+1;\ell'+1m'+1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\\\mathcal{F}_{\ell m;\ell'm'}^{-}&=-2\alpha_\ell^{-m}\gamma_{\ell'}^{m'}G_{\ell m-1;\ell'-1m'-1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)+m\zeta_{\ell'}^{m'}G_{\ell m;\ell'-1m'}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\\&+2\alpha_\ell^m\gamma_{\ell'}^{-m'}G_{\ell m+1;\ell'-1m'+1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right)\end{aligned} \tag{Δ′.12}$$

και

$$\gamma_\ell^m=\frac{[(\ell+m)(\ell+m-1)]^{1/2}}{2[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}, \tag{Δ′.13}$$

$$\zeta_\ell^m=\frac{[(\ell+m)(\ell-m)]^{1/2}}{[(2\ell-1)(2\ell+1)]^{1/2}}. \tag{Δ′.14}$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις (Δ′.12) (Δ′.4) και (Δ′.5) καταλήγουμε ότι

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}^{+}_{\ell m;\ell' m'} - \mathcal{F}^{-}_{\ell m;\ell' m'} = 4\pi \sum_{\ell'' m''} & \mathrm{i}^{\ell-\ell'-\ell''-1}(-1)^{m'+m''-1} h_{\ell''}\left(qR_{nn'}\right) Y_{\ell''-m''}\left(\hat{\mathbf{R}}_{nn'}\right) \\
\times \int d\Omega Y_{\ell'' m''}(\hat{\mathbf{r}}) & \Big[2\alpha_{\ell}^{-m} Y_{\ell m-1}(\hat{\mathbf{r}}) \left(\gamma_{\ell'+1}^{-m'+1} Y_{\ell'+1-m'+1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'+1}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \\
- mY_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) & \left(\zeta_{\ell'+1}^{m'} Y_{\ell'+1-m'}(\hat{\mathbf{r}}) + \zeta_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'-1-m'}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \\
-2\alpha_{\ell}^{m} Y_{\ell m+1}(\hat{\mathbf{r}}) & \left(\gamma_{\ell'+1}^{m'+1} Y_{\ell'+1-m'-1}(\hat{\mathbf{r}}) - \gamma_{\ell'}^{-m'} Y_{\ell'-1-m'-1}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \Big] .
\end{aligned} \tag{Δ΄.15}
$$

Χρησιμοποιώντας το σετ των εξισώσεων (Β΄.9) προκύπτει

$$
\mathcal{F}^{+}_{\ell m;\ell' m'} = \mathcal{F}^{-}_{\ell m;\ell' m'} . \tag{Δ΄.16}
$$

Έτσι η (Δ΄.11) από τις (Δ΄.16) και τη δεύτερη σχέση από το σετ των Εξ.(Α΄.11) παίρνει τη μορφή

$$
\begin{aligned}
\Omega^{nn'}_{H\ell m;E\ell' m'} = -\Omega^{nn'}_{E\ell m;H\ell' m'} = \frac{2\ell+1}{\psi_\ell \psi_{\ell'}} & \Big[-2\alpha_{\ell'}^{-m'} \gamma_{\ell}^{m} G_{\ell' m'-1;\ell-1 m-1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right) \\
+m'\zeta_{\ell}^{m} G_{\ell' m';\ell-1 m}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right) & + 2\alpha_{\ell'}^{m'} \gamma_{\ell}^{-m} G_{\ell' m'+1;\ell-1 m+1}\left(\mathbf{R}_{nn'};q\right) \Big] .
\end{aligned} \tag{Δ΄.17}
$$

Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι για $n = n'$, εξ΄ ορισμού ισχύει ότι $\Omega^{nn'}_{\mathrm{LL'}} = 0$.

Παράρτημα Ε΄

Μηχανικό Ανάλογο Ταλαντούμενης Σφαίρας

Όπως συζητήθηκε στο κυρίως κείμενο, η συμπεριφορά της οπτικής απόκρισης μιας σφαίρας με χρονικά περιοδικά μεταβαλλόμενη ακτίνα είναι ισοδύναμη με εκείνη ενός ταλαντωτή, ο οποίος έχει χρονικά μεταβαλλόμενη ιδιοσυχνότητα, κάτι που μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια της εξίσωσης του Mathieu [Εξ. (3.33)]. Στην ειδική περίπτωση που το $\eta \ll 1$ και, ταυτόχρονα, όταν η μελέτη γίνεται στην αδιαβατική ημιστατική περιοχή, η συμπεριφορά ενός τέτοιο συστήματος μπορεί να αναλυθεί ευκολότερα.

Οι κανονικοί τρόποι ταλάντωσης μπορούν να βρεθούν αναζητώντας λύσεις Floquet της μορφής

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{-i(\omega - n\Omega)t}. \tag{Ε΄.1}$$

Περιορίζοντας το άθροισμα σε $2N+1$ όρους,η Εξ. (3.33) οδηγεί σε ένα σύστημα εξισώσεων σε μορφή πινάκων

$$\begin{gathered}\mathrm{Band}_{2N+1}[-\omega_{\mathrm{r}}^2\eta,\ \omega_{\mathrm{r}}^2 - (\omega - n\Omega)^2, -\omega_{\mathrm{r}}^2\eta] \\ (A_{-N}, \ldots, A_0, \ldots, A_N)^T = 0\ ,\end{gathered} \tag{Ε΄.2}$$

όπου με $\mathrm{Band}_M[a, b, c]$ συμβολίζεται ένας banded πίνακας με διάσταση $M \times M$, όπου a, b, c

τα στοιχεία της κάτω διαγωνίου, διαγωνίου και πάνω διαγωνίου, αντίστοιχα, και το n παίρνει τιμές από $-N$ έως N κατά μήκος της διαγωνίου.

Στην αδιαβατική προσέγγιση θεωρούμε ότι $\Omega \to 0$, και η Εξ. (Ε΄.2) παίρνει τη μορφή εξίσωσης ιδιοτιμών ενός συμμετρικού τριδιαγώνιου πίνακα Toeplitz. $\mathrm{Band}_{2N+1}[-\eta,\ 1, -\eta]$, ο οποίος έχει ιδιοτιμές [1]

$$(\omega^2/\omega_{\mathrm{r}}^2)_\nu = 1 - 2\eta\cos\left(\frac{\nu\pi}{2N+2}\right) \tag{Ε΄.3}$$

και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα

$$\mathbf{A}^{(\nu)} = \left(\sin\left(\frac{\nu\pi}{2N+2}\right),\ \sin\left(\frac{\nu 2\pi}{2N+2}\right),\ \ldots,\ \sin\left(\frac{\nu(2N+1)\pi}{2N+2}\right)\right), \tag{Ε΄.4}$$

όπου $\nu = 1, 2, \ldots, 2N+1$. Σύμφωνα με την Εξ. (Ε΄.3), τα μικρότερα και μεγαλύτερα ιδιοδιανύσματα μπορούν να βρεθούν για $\nu = 1$ και $\nu = 2N+1$, ενώ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα έχουν μέγιστη προβολή στην ελαστική συνιστώσα: $|A_0^{(1)}| = |A_0^{(2N+1)}| = 1$. Συνεπώς, περιμένουμε μέγιστα για την ελαστική συνιστώσα στα

$$\begin{aligned}
\omega_- &= \omega_{\mathrm{r}}\sqrt{1 - 2\eta\cos\left(\frac{\pi}{2N+2}\right)} \simeq \omega_{\mathrm{r}}\left[1 - \eta\cos\left(\frac{\pi}{2N+2}\right)\right] \\
\omega_+ &= \omega_{\mathrm{r}}\sqrt{1 - 2\eta\cos\left(\frac{(2N+1)\pi}{2N+2}\right)} \simeq \omega_{\mathrm{r}}\left[1 - \eta\cos\left(\frac{(2N+1)\pi}{2N+2}\right)\right].
\end{aligned}$$

Από την παραπάνω ανάλυση φαίνεται ότι, στο αδιαβατικό όριο ($\Omega \to 0$), οι κυρίαρχες κανονικές συχνότητες που εμφανίζεται η ελαστική συνιστώσα ($n = 0$) έχουν διαφορά

$$\Delta\omega = \omega_+ - \omega_- \simeq 2\omega_{\mathrm{r}}\eta\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{N\pi}{2N+2}\right) \to 2\omega_{\mathrm{r}}\eta\ . \tag{Ε΄.5}$$

[1] S. Noschese, L. Pasquini, and L. Reichel, Numerical Linear Algebra with Applications 20, 302 (2013).