

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra fyzikální elektroniky



Modelování nelokální plazmonické interakce

DIZERTAČNÍ PRÁCE

Vypracoval: Ing. Milan Burda
Školitel: prof. Dr. Ing. Ivan Richter
Školitel specialista: Ing. Pavel Kwiecien, Ph.D.
Rok: 2023

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

Praha, 31. března 2023

Ing. Milan Burda

Poděkování

Tímto bych velice rád poděkoval předně profesorovi Ivanu Richterovi za trpělivost, čas, podporu, cenné připomínky a odborné diskuze, které mi při práci na této dizertaci velmi pomohly. Dále bych též rád poděkoval doktoru Pavlu Kwiecienovi za podnětné rady týkající se implementace zde diskutovaných modelů do matematického softwaru. Mnohokrát také děkuji inženýru Filipu Havlovi za pomoc při řešení technických záležitostí s textovým editorem. Rád bych taktéž vyjádřil poděkování za to, že práce na této dizertaci byla finančně podpořena z projektů:

Projekt GAČR (21-05259S): 07/2021—06/2024 Nanostructured multilayers with controlled plasmonic response for sensor applications and quantum technologies

Projekt GAČR (19-00062S): 01/2019—06/2022 Advanced functionalities in subwavelength photonic and plasmonic structures

Projekt GAČR (16-00329S): 01/2016—12/2018 Novel effects and functionalities in subwavelength guided-wave photonic structures

Projekt Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/-0000778 - MŠMT, Evropské strukturální a investiční fondy, Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání) 01/2018—06/2023

GAČR Projekt excellence (P205/12/G118): 01/2012—12/2018 Nanobiophotonics for future health care

Projekt MŠMT (COST MP1403 - Nanoscale quantum optics - LD15075): 2015—2017 Novel plasmonic and metamaterial nanoscale structures

Projekty Studenské grantové soutěže (SGS 22/185/OHK4/3T/14) Podpora studentského výzkumu fotonických nanostruktur, laserového plazmatu a kvantových technologií II, (19/192/OHK4/3T/14) Podpora studentského výzkumu fotonických nanostruktur, laserového plazmatu a kvantových technologií a (16/248/OHK4/3T/14) Výzkum optických (nano)struktur a laserového plazmatu

Ing. Milan Burda

Název práce:

Modelování nelokální plazmonické interakce

Autor: Ing. Milan Burda

Doktorský studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Fyzikální inženýrství

Druh práce: Dizertační práce

Školitel: prof. Dr. Ing. Ivan Richter

Školitel specialista: Ing. Pavel Kwiecien, Ph.D.

Abstrakt:

Se zdokonalujícími se technologiemi výroby kovových nanostruktur a na nich založených aplikací vzniká současně potřeba vývoje přesnějších simulačních modelů zahrnujících nelokální efekty. Na pomezí mezi kvantovým a klasickým popisem interakce elektromagnetického (EM) pole s plazmonickým materiálem zaujímá zásadní roli právě popis nelokálních procesů. Z tohoto důvodu je tato práce zaměřena na zmíněnou problematiku nelokální interakce. Pozornost je zde věnována klasifikaci možných nelokálních odezev, hydrodynamickému (HD) modelu a jeho modifikacím, též analytickým výpočtům interakce EM pole se základními plazmonickými strukturami. V této práci je podrobněji rozebrán případ interakce rovinné EM vlny se sférickou kovovou částicí. Pro tuto geometrii je zde uveden postup řešení interakce definované HD modelem. Rovněž jsou také navrženy možné modifikace HD modelu, které by zohledňovaly i hypotetické jiné varianty útlumu indukované proudové hustoty. Uvažované modely jsou doplněny o vybrané výpočty polí a účinného průřezu extinkce pro sférickou částici. V navazující kapitole je podrobně odvozena přenosová matice řešící HD model planární kovové vrstvy, která interaguje s dopadající rovinnou vlnou o transverzálně-magnetické polarizaci (TM). Pro zmíněnou konfiguraci TM rovinné vlny a kovové vrstvy jsou také zjištěny přibližné rozsahy důležitých parametrů, při nichž je nelokální odezva nejsilnější. Z těchto dvou příkladů podrobněji rozebráných v této práci vyplývá, že samotný projev nelokální interakce je značnou měrou podmíněn tvarem zkoumané struktury. Toto tvrzení je možné vyvodit například z geometrií zkoumaných v práci. Pro sférickou částici například platí, že vykazuje modrý posuv hlavního rezonančního maxima, zatímco rovinná kovová vrstva se vyznačuje naopak rudým posunem rezonance. Nejdůležitější výsledky se již podařilo publikovat, resp. budou publikovány. Výsledky tvoří základ jednak pro zpřesnění klasických modelů a jednak pro přechod ke kvantové plazmonice.

Klíčová slova:

Povrchový plazmon-polariton, rezonance povrchového plazmonu, nelokální interakce, hydrodynamický model (HD), modrý posuv, Lindhardův model, kovová nanočástice, longitudinální elektrické pole, transverzální elektrické pole

Title:

Modeling of nonlocal plasmonic interaction

Author: Ing. Milan Burda

Abstract:

With the advancement of metal nanostructure manufacturing technologies and their applications, there is a need to develop more accurate simulation models including those covering non-local effects. Between the quantum and classical description of the interaction of the electromagnetic (EM) field with a plasmonic material, the description of nonlocal processes plays a crucial role. For this reason, this Dissertation thesis is focused on the above mentioned issue of non-local plasmonic interaction. It includes classification of potential non-local responses, hydrodynamic (HD) model and its modifications, and also the model of analytical calculations of EM field interaction with basic plasmonic structures. In this thesis, the case of interaction of a planar EM wave with a spherical metal particle is discussed in more detail. For this geometry, we have elaborated the procedure for solving the interaction defined by the HD model. Additionally, possible modifications of HD model are proposed, which would take into account also hypothetical other variants of attenuation of induced current density. The considered models are supplemented with selected field calculations and the extinction cross sections for the spherical particle. In the next chapter, the transmission matrix approach, solving the HD model of a planar metal layer, which interacts with the incident plane wave on transverse-magnetic polarization (TM), is analysed in detail. For the TM plane wave and metal layer configuration, approximate ranges of important parameters, at which the non-local response is strongest, are also found. These two examples discussed in more detail in this thesis show that the manifestation of the non-local interaction is largely determined by the shape or more generally morphology of the structure under investigation. This can be deduced, for example, from the geometries examined in the thesis, for a spherical particle, it exhibits a blue shift of the main resonant maximum, whereas a planar metal layer is characterized by a red shift of the resonance. The achieved results described in this thesis gives, in my opinion, a good foundation for the further follow-up research.

Key words: Surface plasmon-polariton, surface plasmon resonance, nonlocal interaction, hydrodynamic model, blue shift, Lindhard theory, metallic nanoparticle, longitudinal electric field, transversal electric field

Obsah

Obsah	vii
Úvod	1
1 Kvantový pohled na elektronový plyn	7
1.1 Stručný přehled kvantově plazmonických jevů	7
1.2 Želý model permitivity kovu	9
1.3 Dynamická korelace elektronové hustoty	11
1.4 Konzistentní teorie stínění	13
1.5 Permitivita kovu v blízkosti rozhraní	15
1.6 Jev tunelování	15
1.6.1 Tunelování elektronu přes potenciálovou bariéru	17
1.6.2 Výpočet tunelovacího proudu	20
2 Nelokální vlastnosti a modely v plazmonice	23
2.1 Nelokální disperze ve Fourierově prostoru vlnových čísel	24
2.2 Klasifikace optické nelokální disperze	26
2.2.1 Skalární lokální odezva	27
2.2.2 Nelokální odezva s lokální stopou	28
2.2.3 Longitudinální nelokální odezva	29
2.2.4 Transverzální nelokální odezva a další možné typy odezev	31
3 Standardní hydrodynamický model a některé jeho modifikace	35
3.1 Linearizovaná forma hydrodynamického modelu	35
3.2 Dvou složkový HDM	37
4 Hydrodynamický model sférické kovové částice	39
4.1 Řešení hydrodynamického modelu ve sférických souřadnicích	41
4.2 Vlastnosti longitudinálního a transverzálního proudu	42
4.3 Implementace hydrodynamického modelu	43
4.4 Hydrodynamický model s radiačním útlumem	44
4.5 Hydrodynamický model s radiačním a viskózním útlumem	46
4.6 Vybrané simulace dle HD modelu a jeho navržených modifikací	47
5 Nelokální model kovové vrstvy a dvojvrstvy	51
5.1 Nelokální přenosová matice kovové vrstvy	54
5.2 Nelokální přenosová matice kovové dvojvrstvy	58
5.3 Nelokální odchylka reflektance kovové vrstvy	63
5.4 Modifikace útlumové konstanty	66
5.5 Nelokální odchylka reflektance kovové dvojvrstvy	68
5.5.1 Nelokální symetrické dvojvrstvy	69
5.5.2 Nelokální asymetrické dvojvrstvy	70

6 Nelokální modifikace fourierovské modální metody	75
6.1 Úloha na vlastní čísla pro transversální pole	77
6.2 Longitudinální pole v periodické difrakční mřížce	80
Závěr	95
Relevantní vědecké výstupy autora	97
Seznam použitých zdrojů	99
Přílohy	108
A Dodatek	109
A.1 Vlnová funkce mnohočásticového systému fermionů	109
A.1.1 Slaterův determinant	109
A.2 Vlnová funkce systému fermionů ve Fockově reprezentaci	109
A.3 Model žele	111

Úvod

Plazmonika je rychle se rozvíjející multidisciplinární obor, kde se prolínají znalosti z elektrodynamiky, kvantové fyziky, fyziky pevných látek nebo také biologie a medicíny ve vývoji bio-medicínských aplikací. Vývoj plazmoniky lze nejspíše ilustrovat na problematice popisu lokalizovaného plazmonu, na kterém lze nastínit potřeby stále přesnějších modelů. Nejjednodušším příkladem, který posloužil jako matematické zdůvodnění existence lokalizovaného plazmonu, byl případ kovové částice v dielektrickém prostředí interagující s rovinnou vlnou. Kvůli zjednodušení byl uvažován případ, kdy je částice podstatně menší, než je vlnová délka dopadající rovinné vlny. Po zavedení tohoto omezení je možné, místo přesného řešení Maxwellových rovnic, řešit Laplaceovu rovnici pro skalární potenciál elektrického pole [1]. Z této úlohy označované jako kvazistatická aproximace vyplynuly zajímavé výsledky v podobě Frohlichovy rezonanční podmínky či kvalitativního posouzení míry rozptylu částice vůči její velikosti. Úloha však měla také své nedostatky, neboť nemohla být aplikována na částice, jejichž průměr byl v řádu vlnových délek dopadajícího záření a větších, neboť při této konfiguraci se projevují retardační efekty spojené s nerovnoměrným rozložením pole uvnitř částice.

Tyto nedostatky byly odstraněny nalezením přesného řešení Maxwellových rovnic popisujících interakci rovinné vlny se sférickou částicí. První práce v níž byly odvozeny vztahy pro účinné průřezy absorpce, rozptylu či jejich součtu označovaném jako extinkce, byla publikována v roce 1908 a v literatuře je označována jako Mieho teorie [2]. Jakkoliv je Mieho teorie úspěšná, z teoretického hlediska má též své nedostatky. Ty se týkají především definování okrajových podmínek či skutečnosti, že v případě kovové částice nezohledňuje efekty spojené s vybuzením excitonů v dielektrických materiálech či indukovaným proudem a nábojem v případě kovu. Zmíněné efekty jsou procesy úzce svázané s materiálovými vlastnostmi a nelze je obsáhnout pouze jednou rovnicí v podobě vlnové rovnice šíření elektromagnetického pole. Již v šedesátých letech byla budována teorie popisu dielektrických materiálů zpřesňující interakci dielektrika s dopadající vlnou v blízkosti excitonové spektrální čáry [3]. Za tohoto předpokladu se musí brát v úvahu přenos energie v krystalu dielektrika nejenom pomocí elektromagnetické vlny, ale také excitací elektron-děrového páru (excitonu). To má za následek, že veličina polarizovatelnosti daného materiálu je disperzně závislá nejenom na vlnové délce, ale nově také na vlnovém čísle.

Materiály, které projevují disperzi závislou na vlnovém čísle, jsou označovány jako nelokální prostředí či prostředí s prostorovou disperzí. Řešení interakce nelokálního materiálu s elektromagnetickou vlnou však znamená, že krom Maxwellových rovnic je třeba klasický model doplnit o rovnice fyzikálního procesu, který vytváří nelokální chování materiálu. Tyto dodatečné rovnice jsou příčinou existence dalších vln (řešení), což má za následek, že okrajové podmínky pro klasický případ (spojitost tečných složek elektrického \mathbf{E} a magnetického pole \mathbf{H}) nejsou již dostačující. Diskuze ohledně vhodných okrajových podmínek pro nelokální dielektrika probíhala v sedmdesátých letech a bylo navrženo několik možných typů okrajových podmínek pro různé druhy materiálů [4–6]. Následně bylo expe-

rimentálně zjištěno, že lze vybudit povrchové polaritony-excitony evanescentní vlnou při totálním odrazu v blízkosti polaritonové-excitonové čáry daného dielektrického materiálu. Excitace zmíněných kvazičástic se projevuje jevem zeslabení totálního odrazu „attenuated total reflection“ v literatuře označovaným zkratkou (ATR) [7, 8]. Na dříve vybudovaný teoretický základ a na experimentální měření navazují práce, zkoumající vhodnost volby dodatečných okrajových podmínek na výpočty spektrální závislosti reflektivity dielektrických či polovodičových materiálů v různých rozsazích vlnových délek [9]. Typ okrajových podmínek je kupříkladu závislý na předpokladu, že na povrchovém rozhraní dochází k elastickému či neelastickému rozptylu excitonu [9].

Souběžně s budováním přesnějších modelů popisu interakce EM pole s dielektrickými strukturami bylo zaměřeno úsilí i na nalezení vhodnějších modelů pro kovové částice, neboť dielektrická aproximace vlastností kovu, jež byla využita například v Mieho teorii, je principiálně nedostačující. Jedním z prvních záměrů byla snaha o adekvátní popis mechanismů interakce sférických částic podstatně menších rozměrů, než je vlnová délka dopadající rovinné vlny, jejichž důsledkem je inverzně se rozšiřující absorpční maximum v oblasti rezonanční frekvence vzhledem k velikosti částice. Dle [10] je klasické zdůvodnění opírající se o fenomenologicky definované vztahy mezi volnou dráhou elektronu, interakčního času a vodivosti v rozporu s kvantově-mechanickým pohledem. Hlavním efektem ovlivňujícím útlum kmitů elektronového plynu či pološířku maxima absorpce by měly být energetické přechody mezi módy plazmatu, jež jsou závislé na velikosti částice a energetickými stavy jednotlivých elektronů. Posledně jmenovaný kvantově-mechanický model, jak se lze dočíst v [11], nebyl úspěšně dořešen z důvodu jisté nekonzistentnosti.

Následně byly hledány i jiné možnosti popisu. Jednou z vhodných cest se jevilo využití hydrodynamického modelu (HDM) [12], přičemž se ukázalo, že je HDM vhodným nástrojem pro popis nelokálního chování kovu. Výhodou tohoto semi-klasického přístupu je především to, že je oproti plně kvantovému jednodušší, a tak lze aplikovat mnohé postupy standardní elektrodynamiky. V případě interakce rovinné vlny s vybranými geometrickými útvary je možné získat i analytická řešení. Výzkum v této oblasti však probíhá do současnosti. Jakkoliv byla možnost aplikace HDM, jakožto jednou z cest, jak zkoumat nelokální interakce nanostruktury s elektromagnetickou vlnou, diskutována poměrně dávno, celá řada otázek přetrvává doposud. Navíc postupy jakými je možné HDM aplikovat nejsou zcela přímočaré. Dalším efektem je difúze elektronů z míst s vysokou hustotou do míst ve struktuře s nižší hustotou elektronového plynu. Tento jev vlastně narušuje proces vlnění elektronového plynu. Započítáním těchto dvou efektů difúze a útlumu lze elegantně provést modifikaci HDM [13].

Jedním z hlavních projevů nelokální interakce kovových nanostruktur je oslabení intenzity elektrického pole především v okolí ostrých rozhraní materiálu a existence modrého posuvu hlavního rezonančního maxima, přičemž velikost tohoto posuvu je funkcí velikosti částice.

Posledně jmenovaný jev se podařilo i experimentálně ověřit [14]. Nicméně simulacemi zjištěná velikost modrého posuvu je závislá i na dalších fyzikálních jevech. Kupříkladu lze zmínit efekt závislosti útlumu elektronového plynu na velikosti kovové nanočástice, jež má příčinu v rozptylu elektronů na jejím povrchu. V literatuře je označován jako Kreibigův či Landaův útlum.

Důležitou roli může hrát jev označovaný jako „spill out“ efekt, tedy to, že elektrony kovu se mohou s nenulovou pravděpodobností nacházet mimo hranice kovu. To se projeví změ-

nou permitivity v blízkém okolí rozhraní kovu. Velmi významným jevem, jenž je velmi úzce svázán se „spill out“ efektem je kvantové tunelování mezi dvěma blízkými nanostrukturami, jejichž vzdálenost je menší než 1 nm. V režimu tunelování mohou elektrony z jedné struktury přecházet do druhé. Oproti klasickým výpočtům, vycházejících pouze z Maxwellových rovnic, zahrnutí jevu tunelování vede k fyzikálně přijatelnějším výsledkům. Konkrétně elektrické pole je mezi nanostrukturami podstatně slabší a navíc nastává modrý posuv hlavního rezonančního maxima [15, 16].

Stručný výhled aplikací moderní plazmoniky

Zde zmíněné nejvýznamnější efekty, jež byly postupem času ověřovány a uvažovány, jednak zpřesňovaly současné popisy interakcí a jednak jsou současně inspirací pro mnohé aplikace a naopak. Simulace, které jsou nutné pro návrh zamýšlených aplikací, by měly zahrnovat nelokální a kvantové efekty, aby byly úspěšně a co nejpřesněji naladěny cílené vlastnosti struktury materiálu či vyvíjeného zařízení. Využití unikátních vlastností plazmonických materiálů je obsahem mnoha studií v různých oblastech. Jedním takovým směrem je vývoj nejrůznějších chemických a biologických senzorů, jejichž funkce může být založena na různých fyzikálních procesech. Sensory mohou pracovat na základě vybuzení takzvané „surface plasmon resonance“ (SPR), tedy povrchové plazmonové rezonance, a to jak v případě lokalizované varianty rezonance „localized surface plasmon resonance“ (LSPR), tak v situaci kdy jsou uplatněny vlastnosti šířivého typu plazmonové rezonance označované jako „surface plasmon-polariton“ (SPP), tedy povrchový plazmon-polariton [17]. Existuje však i celá škála možných návrhů senzorů vycházejících z pokročilých konstrukcí a simulací. Příkladem mohou být senzory mimořádné optické transmise „extraordinary optical transmission“ (EOT) v případě nano-strukturované metalické vrstvy ve formě pole děr [18] či interferometrické senzory [19].

Na poněkud odlišném principu fungují spektroskopické aplikace, kde hlavní roli hraje mechanismus nazvaný „surface-enhanced Raman scattering“ (SERS), tedy povrchově zesílený Ramanův rozptyl [20]. Velikost rozptylu je velmi závislá na intenzitě elektrického pole, které může být významně ovlivněno nelokálními jevy [21]. Dalším významným uplatněním jevu plazmonové rezonance je oblast vývoje plazmonových laserů v literatuře označovaných jako SPASER, které by mohly nalézt velké využití v oblastech jako je optická komunikace, biomedicínské aplikace či v nových možnostech týkajících se uchovávání dat. Jak se však ukazuje, je nutné i zde počítat s tím, že nelokální interakce může hrát významnou roli [22, 23].

Často zmiňovaným směrem výzkumu v souvislosti s oborem plazmoniky je vývoj účinnějších a cenově dostupnějších solárních článků. K dosažení vyšší účinnosti je nutné docílit vyšší absorpce fotonu v materiálu, čehož se dosahuje několika možnými přístupy. Je možné využít kovových nanostruktur, které mohou vytvářet rozptylovou vrstvu, nebo se rezonančně zesílí absorpce díky lokalizované plazmonové rezonanci. Dalším z možných přístupů je například cílený návrh geometrie spodní kovové vrstvy tak, aby se dopadající záření efektivně měnilo ve vázané módy pole uvnitř polovodičové vrstvy [24, 25]. Z tohoto krátkého výčtu některých aplikací plazmonických materiálů je zřejmý velký význam oboru plazmoniky ve vývoji nových technologií, ale také je patrná nutnost přesnějších popisů zohledňujících v minulosti zanedbávané jevy.

Tato práce je zaměřena především na nejnovější metody a poznatky popisu nelokálních jevů, uvádí některá zobecnění HDM týkající se útlumu elektronového plynu a přináší též analytická řešení interakce pro jednoduché struktury, konkrétně sférickou částici a soustavu jedno-dimenzionálních planárních dielektricko-kovových vrstev.

Cíle a struktura textu dizertace

Cíle této práce spadají do oblasti moderní plazmoniky, je potřeba nelokálního popisu jako prostředníka mezi lokálním a kvantovým popisem jevů mezi kovovými strukturami.

Cílem je především prozkoumat možnosti popisu nelokálních jevů, pro vybrané geometrické struktury zdokumentovat hlavní kroky odvození nelokálních modelů, tyto modely aplikovat k simulaci důležitých fyzikálních veličin a obdržené výsledky stručně okomentovat.

Cíle této práce byly shrnuty do několika stručných bodů:

1. Objasnit teoretický základ Lindhardova modelu kovu a posoudit jeho možné využití pro modelaci nelokálních jevů zasahujících do oblasti kvantových jevů, neboť se zdá být relevantním k popisu jevů odehrávajících se na samotném rozhraní kovu a okolního prostředí.
2. Provést obecnou klasifikaci možných matematických forem nelokálních HD modelů a poukázat na jejich řešení jako základ pro možnost využití podkladů pro potenciální navazující výzkum.
3. Analyzovat z teoretického hlediska v obecné formě všechny možné typy nelokální odezvy dle typu řídicí diferenciální rovnice proudové hustoty v modelu HDM.
4. Posoudit možnosti zobecnění HDM, a to konkrétně zaměřením se na útlumový člen, zvážit tak zahrnutí radiálního či viskózního tlumení proudové hustoty jako analogie k viskóznímu útlumu v kapalinách.
5. Navrhnout analytický nelokální model přesného řešení HDM pro izolovanou kovovou vrstvu. Vytvořit analytický nelokální model pro tenkou kovovou vrstvu v podobě zobecnění metody přenosové matice a dále provést analýzu nelokální odchylky zvolené veličiny vhodné k charakterizaci reflektance kovových vrstev.
6. Analyzovat nelokální odezvu kovové dvojrůstvy. Jedná se o nový typ struktury, který není v literatuře zmíněn, respektive že by se jí již někdo zabýval. To byl důvod tohoto cíle, neboť lze očekávat zajímavé chování při vzájemné interakci dotýkajících se kovových nelokálních materiálů.
7. Navrhnout teoretický model, který by popisoval periodickou binární mřížku s nelokálními kovovými elementy. Popis bude založen na zobecnění RCWA metody, a to i v případě že se dotýká vícero nelokálních segmentů mřížky, či je celá mřížka složena výhradně z nelokálních segmentů.

Text této práce je členěn do šesti kapitol. V první kapitole je detailně odvozena Lindhardova teorie elektronového plynu, jež vychází z želé modelu. Odvození nabízí hlubší vhled do fyzikální podstaty kvantové povahy permitivity prostředí. A může se stát cenným pro návrhy modelů vycházejících z teoretického základu Lindhardovy teorie. Obsahem druhé kapitoly je klasifikace různých typů nelokální odezvy materiálu. Zmíněn je popis z pohledu Fourierova prostoru vlnových čísel, výrazná část je však zaměřena na formulaci ve standardních prostorových souřadnicích a to z praktického důvodu, že takovýto postup lze přímo využít pro odvození konkrétních modelů a následné hledání interakce plazmonické struktury s dopadající EM vlnou. Ve třetí kapitole je uveden hydrodynamický model a

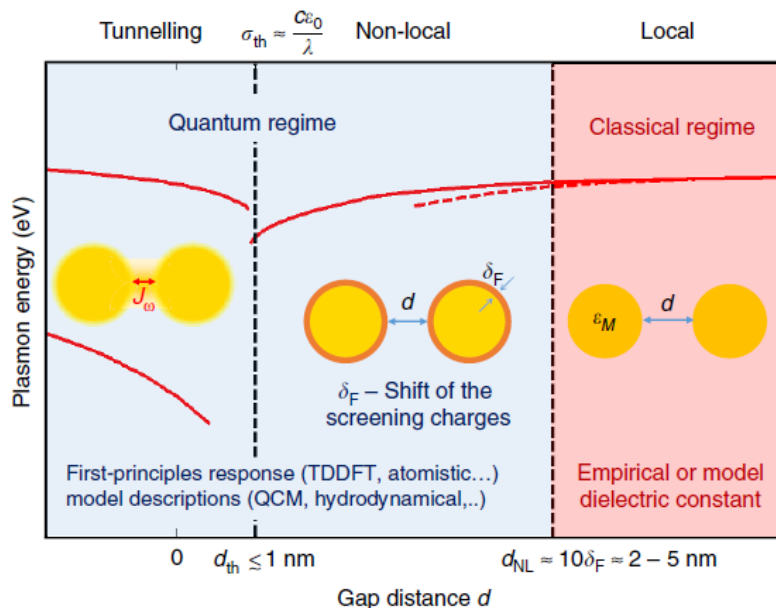
některé jeho modifikace. Ve čtvrté kapitole je uvedena nelokální interakce kovové sférické částice s dopadající EM vlnou. Nejprve je ve stručnosti uvedena Mieho teorie, neboť lze z této teorie vycházet při odvození nelokálního modelu kovové sférické částice jakožto řešení HDM. Dále jsou navrženy modifikace HDM tak, aby mohl být do modelu zaveden útlum, kterým by bylo zohledněno případné radiální a viskózní tlumení elektronového plynu. Následně jsou porovnány vybrané simulace účinných průřezů extinkce a elektrického pole při interakci stříbrné a zlaté částice s rovinnou vlnou. Pátá kapitola je věnována nelokálnímu modelu rovinné kovové vrstvy a dvojvrstvy, která interaguje s dopadající rovinnou vlnou. Základem tohoto modelu je opět HDM. Řešení úlohy je hledáno v podobě přenosové matice, z níž lze následně odvodit reflexní a transmisní koeficienty, jejichž spektrální průběhy jsou cenné pro analýzu vlastností kovové vrstvy. Pro vybrané parametry dopadu rovinné EM vlny a tloušťky zlaté i stříbrné vrstvy jsou uvedeny spektrální průběhy zmíněných reflexních a transmisních koeficientů, a jsou porovnány s jejich variantami odvozenými standardní cestou z klasické elektrodynamiky. Šestá kapitola byla zaměřena na nelokální modifikace fourierovské modální metody. V kapitole se věnujeme úlohám na vlastní čísla jak pro longitudinální, tak pro transverzální pole a zároveň pro různé typy binárních mřížek. Tato práce je zakončena závěrem, v němž jsou stručně shrnuty dosažené výsledky a nastíněny další možné směry výzkumu.

Kvantový pohled na elektronový plyn

Cílem této kapitoly je uvedení základních myšlenek, na kterých jsou vybudovány některé kvantově mechanické modely permitivity kovu a blízkého okolí rozhraní kovu. Kvantový pohled na daný problém je velice cenný, neboť nám umožňuje další možný vhled na problematiku nelokální disperze, z čehož lze následně vycházet při porovnání HD modelu s kvantovým. Nebo nám může naznačit cestu, jak je možné pozměnit a vylepšit HD model nebo samotný kvantový model.

1.1 Stručný přehled kvantově plazmonických jevů

Kvantové jevy se odehrávají převážně na povrchu nanočástic. Čím je částice menších rozměrů, tím je povrch větší vůči objemu. A tím roste význam kvantových jevů. Pro ilustraci základních režimů interakcí poslouží následující obrázek 1.1 převzatý z [16], kde jsou schématicky znázorněny tři základní úrovně odezvy vzhledem ke vzdálenosti kovových sférických částic dimeru. Klasický režim popisu lze použít pro částice větších rozměrů než 10 nm, a zároveň pokud je jejich vzájemná vzdálenost větší než 5 nm (na obrázku vpravo). Prostřední část obrázku naznačuje, že pokud se vzdálenost mezi částicemi dimeru pohybuje v rozmezí 1 až 5 nm, pak se objeví nelokální jevy, které zapříčiní změnu rozložení povrchového náboje, což se projeví v jiné efektivní vzdálenosti částic dimeru. S tímto jevem úzce souvisí i takzvaný „spill out“ efekt („vylití“), jenž je důsledkem kvantové povahy elektronu. Ten může s jistou pravděpodobností překonat potenciálovou bariéru vázanou na geometrickou hranici částice [26, 27], kdy se elektrony kovu mohou s nenulovou pravděpodobností nacházet mimo hranice kovu. To se projeví změnou permitivity v blízkém okolí rozhraní kovu, což ve svém důsledku může mít významný vliv na změnu účinného průřezu extinkce a také na velikost pole v okolí dané struktury [27, 28]. Délka spill-out efektu je charakterizována Feibelmanovými parametry d (typicky několik angstromů) [29–31]. O numerický popis nelokálního chování kovu a spill out efektu se snaží „Self-Consistent“ hydrodynamický model (SC-HD) [26, 32–34].



Obrázek 1.1: Znázornění přechodů mezi režimy interakce v závislosti na vzdálenosti mezi kovovými nanočásticemi [16]

Dalším režimem zobrazeným na obrázku 1.1 vlevo je případ, kdy je vzájemná vzdálenost částic dimeru menší než 1 nm. Za takového uspořádání se musí již počítat s kvantově fyzikálními procesy tunelování elektronu, což vlastně vyústí v propojení elektronových oblaků volných elektronů na hranici obou částic. Nejspíše nejjednodušší možností, jak tento režim interakce analyzovat, aniž by se musely řešit kvantově mechanické simulace celé struktury, je využití semi-klasického přístupu. V poslední době je v této souvislosti často diskutován takzvaný „Quantum Corrected Model“ (QCM) [15, 35]. Stěžejní částí tohoto modelu je nahrazení oblasti tunelování elektronů mezi dvěma kovovými nanostrukturami fiktivním vodivým materiálem o definovaných vlastnostech tak, aby bylo možné provádět simulace interakce nanostruktur již jen jako řešení klasické (nelokální) EM úlohy. QCM obsahuje několik dílčích kroků. Jedním z nich je nalezení výstupního potenciálu elektronu vytvářejícího energetickou bariéru pro tunelující elektron na rozhraní kovu a obklopujícího prostředí dané kovové struktury. V této práci se budeme stručně zabývat kvantovým pohledem na elektronový plyn (na obrázku vpravo). Stěžejní však pro naši práci je popis nelokálních jevů, které představují jistého prostředníka mezi lokálním a kvantovým popisem interakcí mezi kovovými nanočásticemi (na obrázku vlevo a uprostřed).

Poměrně zajímavou otázkou je rychlost útlumu módů pole uvnitř nanočástice. Významnou úlohu při tom hraje útlum vycházející z kvantových dějů na rozhraní částice a okolního prostředí označovaný jako Landauův útlum [36], projevující se nárůstem útlumu v oblastech zesíleného pole [37]. Celkový útlum je větší pro menší částice, neboť mají i větší povrch vzhledem ke svému objemu. Obecně se považuje za původ tohoto útlumu proces zániku plazmonů, jejichž vlnový vektor překračuje hodnotu ω/v_F , kde v_F je Fermiho rychlost. V takovém případě se plazmony rozpadají na elektron-děrové páry [38, 39].

Jedním z jevů, které též stojí za zmínku, je takzvaný „Quantum size effect“, tedy kvantový jev svázaný s velikostí kovové částice. Na mikroskopické úrovni již vodivostní pás přestává být spojitým a dochází k jeho rozštěpení na diskrétní energetické hladiny. To má však za následek, že přestávají platit běžně zavedené vztahy pro permitivitu kovu, vlnová délka rezonančního maxima vykáže výrazný modrý posuv a také dojde k rozšíření oblasti

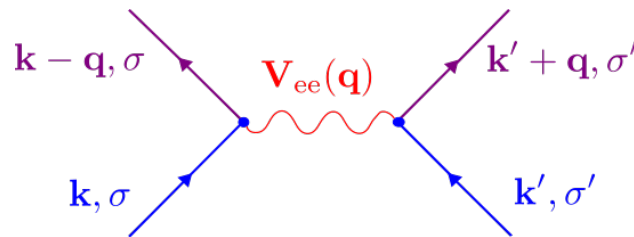
rezonance [40].

Dokladem o kvantové povaze povrchového plazmonu je též vlastnost označovaná jako „entanglement“, tedy jako provázanost. Průkopnickou prací v této oblasti výzkumu byl experiment, kdy byly vytvořeny polarizačně provázané fotony, které následně interagovaly se zlatým filmem v podobě periodické mřížky s dírami subvlnových rozměrů. Během experimentu bylo prokázáno, že fotony, které nezankly a účastnily se konverze z fotonu do povrchového plazmonu a z plazmonu zpět na foton, si zachovávaly ve velké míře svoji původní polarizační propletenost [41].

Kvůli lepšímu pochopení kvantově-plazmonických jevů vzniká potřeba vývoje nových postupů a metod, které by umožňovaly tyto procesy účinně analyzovat. V poslední době se jako jedna z možných cest jeví popis založený na kvantování plazmonu-polaritonu, avšak není zde jednoznačný postup, jak k tomu dojít. Nabízí se několik možností, například kvantování provést diskretizací klasických módů polí uvnitř struktury, nebo využít postup korespondence mezi vektorovým potenciálem a anihilačními, respektive kreačními operátory [42, 43]. Z hlediska rigoróznosti a konzistence analýzy uvažované struktury je ale nejvýhodnější využít teorii funkcionálu hustoty (DFT) [44, 45]. Kvůli obrovské výpočetní náročnosti, a tedy omezení velikosti báze (počtu bazových funkcí) není DFT metoda pro kovy nejvhodnějším nástrojem [46, 47]. Z tohoto pohledu i pro zde uváděné účely se jeví jako vhodné zabývat se žele modelem, což bude částečně obsahem další části kapitoly.

1.2 Želé model permitivity kovu

Kondenzovaná hmota představuje natolik složitý kvantový systém, že není možné se zabývat exaktním popisem jednotlivých elektronů a iontů látky. Je nevyhnutelné učinit řadu aproximativních předpokladů umožňujících nahlížet na interakci prostředí prostřednictvím efektivních veličin prostředí. Pro mnohé fyzikální jevy našla uplatnění, jako uspokojivý fyzikální model, teorie středního pole (Mean field theory) [46, 48]. Do této kategorie patří i takzvaný „želé model“ („Jellium Model“), jehož interpretace je následující. Každý jednotlivý elektron elektronového plynu se pohybuje v efektivním potenciálu, který je utvářen jak samotným elektronovým plynem, tak nehybným iontovým pozadím materiálu.



Obrázek 1.2: Feynmanův diagram elektron-elektronové interakce v rámci žele modelu. Elektron o hybnosti k je rozptýlen do nového stavu o hybnosti $k - q$, zatímco druhý elektron je rozptýlen z k' do $k' + q$.

Teorie středního pole využívá elegantním způsobem formalismus druhého kvantování. Vlastnosti vlnových funkcí fermionů lze přenést na anihilační a kreační operátory, což umožňuje zohlednit kvantovou povahu elektronového plynu, aniž by bylo nutné se zaobírat vlnovou funkcí mnohočásticového systému elektronů. Stejně jako v případě klasického modelu permitivity kovu i v žele modelu hraje stěžejní roli odezva elektronového plynu na elektromagnetické pole. Není tudíž překvapivé, že Hamiltonián elektronového plynu v

intencích žele modelu je jakýmsi výchozím bodem pro zde zamýšlený rozbor Lindhardova modelu kovu [49]. Jeho podoba ve fourierovské doméně vlnových čísel je následující:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},\sigma} \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} v_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \quad . \quad (1.1)$$

Cenné připomínky k odvození Hamiltoniánu (1.1) nalezneme čtenář v dodatku této práce. Obsáhlejší informace a širší souvislosti je možné nalézt v [50, 51], zde se však omezíme pouze jen na vysvětlení využitých symbolů. První suma v (1.1) má význam součtu všech jednoelektronových Hamiltoniánů, člen $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ označuje energii daného stavu elektronu, náležící vlnovému číslu \mathbf{k} . Pro jeho kinetickou a potenciální energii v periodické mřížce materiálu pro konkrétní $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ platí:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r \quad , \quad (1.2)$$

přičemž $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ je vlnovou funkcí elektronu, m_e jeho hmotnost a $V(\mathbf{r})$ periodický potenciál mřížky. První suma v (1.1) probíhá přes indexy \mathbf{k} a σ , tedy přes vlnové vektory a dvě možné hodnoty spinu. Fermionové kreační $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ a anihilační $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ operátory splňují příslušné komutační a antikomutační relace odpovídající částicovým vlastnostem fermionů [50, 51] a jejich kombinace $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ určuje obsazenost daného kvantového stavu nabývající hodnot 0 či 1.

Druhý člen Hamiltoniánu (1.1), tedy interakční část, má význam korelačních a výměnných korelačních elektron-elektronových interakcí, jež mají ryze Coulombický charakter a jsou reprezentovány Coulombickým potenciálem $v_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 \mathbf{q}^{-2}$ ve Fourierově doméně vlnových vektorů \mathbf{q} . Koeficient L^{-3} před sumou, inverzní k objemu, je důsledkem normování operátorů ($\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger$), respektive vlnových funkcí ($\psi_{\mathbf{k},\sigma}, \psi_{\mathbf{k}',\sigma'}$) faktorem $L^{-3/2}$, tak aby byl zohledněn jejich objem v hybnostním prostoru. To odpovídá požadavku, aby vlnové funkce v limitním případě přecházely na Blochovy vlnové funkce téměř volných elektronů. Parametr 1/2 zajišťuje to, aby každá kombinace interakcí byla započítána pouze jednou.

Interakční část Hamiltoniánu v (1.1) lze dále upravit za pomoci Kroneckerových delta funkcí do matematicky přehlednější formy. Využijme k tomu následující relaci: $\hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$. Po přeuspořádání kreačních a anihilačních operátorů uvnitř sumy získáme:

$$\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}^\dagger \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \quad . \quad (1.3)$$

V souladu s Hartee Fockovou představou, dle které je elektron v efektivním potenciálu vytvářejícím všechny ostatní elektrony, je dále možné zavést průměrování, a tím efektivní potenciál elektronového plynu, v němž se pohybuje každý jednotlivý elektron, následujícím způsobem s vlastním označením veličiny:

$$\xi_{ef,\mathbf{q}} = \frac{1}{2L^3} v_{\mathbf{q}} \left\langle \tilde{\psi} \left| \sum_{\sigma',\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \right| \tilde{\psi} \right\rangle \quad . \quad (1.4)$$

Ve vztahu (1.4) je vlnovou funkcí $\tilde{\psi}$ myšlena celková vlnová funkce všech elektronů elektronového plynu v prostoru. Pomocí (1.4) je možné Hamiltonián (1.1) aproximovat a zároveň tím i podstatně zjednodušit, a to následujícím způsobem:

$$\hat{H} \approx \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{ef,\mathbf{q}}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \quad . \quad (1.5)$$

Střední hodnota (1.4) je klíčovou veličinou, která v sobě zahrnuje zásadní vlastnosti odezvy kovu na elektromagnetické pole, a jejíž vyhodnocení je pilířem Lindhardova modelu. Této záležitosti je věnována značná pozornost v nadcházející části.

1.3 Dynamická korelace elektronové hustoty

Z hlediska dalšího postupu je výhodné vyšetřit vnitřní člen sumy (1.4) v reálných časoprostorových souřadnicích a poté jej znovu přetransformovat do prostoru vlnových čísel a frekvencí. Nejprve je potřeba převést výraz $\langle \tilde{\psi} | \sum_{\sigma', \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} | \tilde{\psi} \rangle$ do reálných souřadnic.

Definujme proto některé nové symboly. Nechť funkce ψ představuje vlnovou funkci mnohočásticového systému všech elektronů v reálném prostoru. Dále nechť je $\hat{N}_{t_0}(\mathbf{r})$ operátor počtu elektronů (kvant energie) v daném místě \mathbf{r} , jež je analogií členu $\sum_{\sigma', \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'}$ v reálném prostoru. Nyní je možné se zaměřit na dynamiku vývoje „braketového“ integrálu z (1.4), tedy na celkový počet interagujících elektronů v čase t , jež označme funkcí $N_{cI}(\mathbf{r}, t)$. V rámci poruchové teorie lze s výhodou využít Heisenbergův interakční obraz pro počáteční interakční operátor $\hat{N}_{t_0}(\mathbf{r})$, za předpokladu, že lze časový vývoj neporušeného systému elektronového plynu, bez vlivu vnějšího pole, popsat Hamiltoniánem jako operátor s časovou závislostí $\hat{\mathbf{H}}(t - t_0)$. Očekávejme dále, že změny vývoje systému elektronového plynu vyvolané působením vnějšího pole jsou dostatečně (adiabaticky) pomalé a je možné je popsat Hamiltoniánem vnějšího pole funkčně závislém na čase $\hat{\mathbf{H}}_{ext}(t - t_0)$. Jestliže vlnová funkce ψ představuje vlnovou funkci systému všech elektronů v čase t_0 , pak platí následující:

$$N_{cI}(\mathbf{r}, t) = \langle \psi | e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{H}}(t-t_0) + \hat{\mathbf{H}}_{ext}(t-t_0))} \hat{N}_{t_0}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{H}}(t-t_0) + \hat{\mathbf{H}}_{ext}(t-t_0))} | \psi \rangle. \quad (1.6)$$

Časový vývoj operátoru počtu elektronů neporušeného systému je možné uvést ve tvaru:

$$\hat{N}(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)} \hat{N}_{t_0}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)}. \quad (1.7)$$

Pro pomalé časové změny je možné časový vývoj vyvolaný působením vnějšího pole aproximovat Taylorovým rozvojem do prvního řádu exponenciálního operátoru $e^{i\hat{\mathbf{H}}_{ext}(t-t_0)}$. Vztah (1.6) lze tak přibližně vyjádřit v podobě:

$$N_{cI}(\mathbf{r}, t) \approx \langle \psi | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \hat{\mathbf{H}}_{ext}(t') dt' \right) \hat{N}(\mathbf{r}, t) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \hat{\mathbf{H}}_{ext}(t') dt' \right) | \psi \rangle = N(\mathbf{r}, t) + N_{ind}(\mathbf{r}, t). \quad (1.8)$$

Funkce počtu elektronů indukovaného vnějším potenciálem je v (1.8) označena jako $N_{ind}(\mathbf{r}, t)$ a lze ji snadno vyjádřit pomocí komutátoru vztahem:

$$N_{ind}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \int_{-\infty}^t [\hat{\mathbf{H}}_{ext}(t'), \hat{N}(\mathbf{r}, t)] dt' | \psi \rangle. \quad (1.9)$$

Předpokládejme dále, že každý jednotlivý elektron se nachází v potenciálovém poli $U(\mathbf{r}'_1, t')$ celkového elektrického pole vzniklého interakcí systému elektronového plynu s vnějším polem. Potenciálová energie celého systému elektronů je v daném bodě úměrná součinu tohoto potenciálu s počtem elektronů. Hamiltonián $\hat{\mathbf{H}}_{ext}(t')$, jež právě zahrnuje vliv vnějšího elektrického pole, lze tak vyjádřit následujícím způsobem:

$$\hat{\mathbf{H}}_{ext}(t') = \int U(\mathbf{r}'_1, t') \hat{N}(\mathbf{r}'_1, t') d\mathbf{r}'_1. \quad (1.10)$$

Dosazením (1.10) do (1.6), a využitím vlastnosti Heavisideovy funkce, lze snadno získat následující vztah:

$$N_{ind}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \int [\hat{N}(\mathbf{r}'_1, t'), \hat{N}(\mathbf{r}, t)] U(\mathbf{r}'_1, t') d\mathbf{r}'_1 dt' | \psi \rangle. \quad (1.11)$$

Vztah (1.11) představuje poměrně komplikovaný výpočet a je vhodné jej provést v několika krocích. Prvně je výhodné se zaměřit pouze na komutátor. Operátor počtu elektronů $\hat{N}(\mathbf{r}, t)$ může vzhledem k povaze fermionů nabývat v daném bodě \mathbf{r} pouze hodnot 0 nebo 1, je však nutné započítat všechny možnosti, které mohou nastat. Vznik elektronu v bodě \mathbf{r} může totiž předcházet zánik elektronu v libovolném bodě \mathbf{r}' v objemu elektronového plynu. Pro korektní popis je tudíž potřeba zahrnout všechny dvouelektronové interakce (vyšší jsou zanedbány) od všech elektronů v objemu. Dále lze předpokládat časoprostorový vývoj kreačního operátoru v podobě rovinné vlny: $\hat{c}_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - (i/\hbar)E_{\mathbf{r}}t}$ a obdobně anihilačního operátoru: $\hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}(\mathbf{r}', t) = \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}' + (i/\hbar)E_{\mathbf{r}'}t}$, kde $E_{\mathbf{r}}$ je energie elektronu v bodě \mathbf{r} . Na základě zde popsaného, jež analogicky platí i pro $\hat{N}(\mathbf{r}'_1, t')$, je možné komutátor v (1.11) vyjádřit jako:

$$\begin{aligned} [\hat{N}(\mathbf{r}'_1, t'), \hat{N}(\mathbf{r}, t)] &= \sum_{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1, \sigma_1} e^{-i\mathbf{k}'(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1)} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{r}_1} - E_{\mathbf{r}'_1})t'} \\ &e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{r}'} - E_{\mathbf{r}})t} [\hat{c}_{\mathbf{r}'_1, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}_1, \sigma_1}, \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}', \sigma}]. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Vyšetřením komutátoru na pravé straně (1.12), jenž může čtenář najít v dodatku této kapitoly, lze získat výraz:

$$[\hat{c}_{\mathbf{r}'_1, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}_1, \sigma_1}, \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}', \sigma}] = \delta_{\sigma, \sigma_1} \delta_{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'} \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1} (\hat{c}_{\mathbf{r}', \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma_1} - \hat{c}_{\mathbf{r}_1, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma}). \quad (1.13)$$

Symboly $\delta_{\sigma, \sigma_1}$, $\delta_{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'}$, $\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1}$ v (1.12) jsou Kroneckerovými delta funkcemi, nutné je si však uvědomit, že se změnou indexu energie se nutně změní i její vnitřní závislost na vlnovém čísle, platí tedy:

$$E_{\mathbf{r}'_1}(\mathbf{k}') \xrightarrow{\delta_{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'}} E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{k}), \quad E_{\mathbf{r}}(\mathbf{k}) \xrightarrow{\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1}} E_{\mathbf{r}_1}(\mathbf{k}'). \quad (1.14)$$

Postupným dosazením (1.12) a (1.13) do (1.11), následnou aplikací Kroneckerových delta funkcí, a poté z důvodu přehlednosti přeznačením jak indexů, tak polohové souřadnice \mathbf{r}_1 na \mathbf{r} , lze pro operátor v rovnici (1.11) nalézt vztah:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \int [\hat{N}(\mathbf{r}'_1, t'), \hat{N}(\mathbf{r}, t)] U(\mathbf{r}'_1, t') d\mathbf{r}'_1 dt' = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \int e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{r}'} - E_{\mathbf{r}})(t-t')} U(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt' \cdot \\ &\quad \left(\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma} (\hat{c}_{\mathbf{r}', \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma} - \hat{c}_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}', \sigma}) \right). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Nyní se můžeme vrátit ke vztahu (1.11). Doposud bylo naší snahou vyhodnotit operátor uvnitř braketových závorek tohoto vztahu a to v reálných časoprostorových souřadnicích. Vzhledem k tomu, že je výraz (1.4) v prostoru vlnových čísel a frekvencí, je záhodno vztah (1.12) do této domény fourierovsky přetransformovat. Tento krok nám umožňuje skutečnost, že byl využit Heisenbergův interakční obraz, čímž byl prostoro-časový vývoj vlnových funkcí převeden na námi vyhodnocovaný operátor. Snadno zjistíme, že integrál na pravé straně rovnice (1.15) má podobu konvoluce v časových i prostorových souřadnicích. Jak známo, Fourierova transformace konvoluce dvou funkcí je rovna součinu Fourierových

obrazů jednotlivých funkcí, což bude níže s výhodou využito. Fourierovu transformaci z $t \xrightarrow{\mathcal{F}} \omega$ i $\mathbf{r} \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbf{q}$ je možné provést odděleně, věnujme se tedy nejprve transformaci do frekvenční domény.

Aby bylo možné transformaci $t \xrightarrow{\mathcal{F}} \omega$ provést, je nutné si pomoci matematickým „trikem“ spočívajícím v zavedení infinitesimálně malé konstanty ζ , která zajistí konvergenci výpočtu pro $t \rightarrow +\infty$. Jednoduše tak lze získat:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega+i\zeta)t} \theta(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{k})-E_{\mathbf{r}}(\mathbf{k}'))t} dt = \int_0^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{k})-E_{\mathbf{r}}(\mathbf{k}')-\hbar\omega-i\gamma)t} dt = -i\hbar(\hbar\omega + E_{\mathbf{r}}(\mathbf{k}') - E_{\mathbf{r}'}(\mathbf{k}) + i\gamma)^{-1}. \quad (1.16)$$

Nově zavedená konstanta γ , jež je rovna $\hbar\zeta$ a má z fyzikálního hlediska význam útlumové konstanty, nemůže být proto infinitesimálně malá, jak bylo naopak požadováno z matematického pohledu.

Obdobně je možné se zaměřit na Fourierovu transformaci $\mathbf{r} \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbf{q}$ první konvolované funkce v (1.15). Dle matematické analýzy zobecněných funkcí platí:

$$\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (1.17)$$

Využitím výsledků (1.17) a (1.16) spolu s (1.15) je možné snadno transformovat vztah pro střední hodnotu množství indukovaných elektronů (1.11) do prostoru proměnných \mathbf{q} a ω , provedeme-li navíc sečtení přes dvě možné hodnoty spinu elektronu σ , a takto získaný výraz pro N_{ind} vydělíme objemem $V = L^3$, dostaneme následující vyjádření pro hustotu elektronového plynu:

$$n_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} N_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \Pi(\mathbf{q}, \omega) U(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\eta_{\mathbf{k}} - \eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) U(\mathbf{q}, \omega)}{\hbar\omega + E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta}. \quad (1.18)$$

Připomeňme, že funkce $\tilde{\psi}$ je vlnovou funkcí celého systému elektronového plynu v doméně vlnových čísel a frekvencí. Veličiny $\eta_{\mathbf{k}}$ a $\eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ v (1.18) mají význam elektronové hustoty, ta se řídí zákony statistické fyziky pro fermiony, tedy Fermi-Diracovým rozdělením. V případě funkce $\eta_{\mathbf{k}}$ platí:

$$\eta_{\mathbf{k}} = V^{-1} \sum_{\sigma} \langle \tilde{\psi} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \tilde{\psi} \rangle = \left(1 + e^{(E(\mathbf{k})-E_F)/k_B T} \right)^{-1}. \quad (1.19)$$

Symbole E_F a k_B označují Fermiho energii a Boltzmanovu konstantu k_B , parametr T představuje termodynamickou teplotou. Funkce $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ je definována samotným vztahem (1.19) a její důležitost vyplyne z následných kroků. Zcela analogické vyjádření, záměnou $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ za \mathbf{k} v (1.19) lze najít pro $\eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Doposud jsme se zabývali relací mezi indukovanou nábojovou hustotou a celkovým potenciálem elektrického pole, avšak vyvstává otázka, jak se tato indukovaná hustota projevuje z hlediska materiálových vlastností kovu. Zodpovězení této otázky se váže na určení vztahu mezi celkovým, indukovaným a vnějším elektrickým potenciálem, což je náplní takzvané konzistentní teorie stínění.

1.4 Konzistentní teorie stínění

Zde se omezíme pouze na stručný popis, podrobnější informace je možné najít v [52]. Celkový potenciál $\varphi(\mathbf{r}, t)$ lze považovat jako součet vnějšího potenciálu $\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t)$ a indukovaného potenciálu $\varphi_{ind}(\mathbf{r}, t)$, jež v daném čase vytváří prostorové rozložení indukované

nábojové hustoty. Současně lze předpokládat, že mezi původním vnějším polem a tedy i potenciálem $\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t)$ a celkovým potenciálem platí vztah, který odráží materiálové vlastnosti prostředí, v němž je nábojová hustota indukována. Zmíněné relace mají následující podobu:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_{ext}(\mathbf{r}, t) + \varphi_{ind}(\mathbf{r}, t), \quad \varepsilon_r(\mathbf{r}, t) * \varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_{ext}(\mathbf{r}, t). \quad (1.20)$$

Druhý ze vztahů (1.20) představuje konvoluci mezi $\varphi(\mathbf{r}, t)$ a materiálovou veličinou relativní permitivity $\varepsilon_r(\mathbf{r}, t)$, v praxi se však očekává, že lze s dobrou přesností aproximovat průběh permitivity $\varepsilon_r(\mathbf{r}, t)$ delta funkcí. Dalším předpokladem je, že lze vyjádřit vztah mezi celkovým potenciálem $\varphi(\mathbf{r}, t)$ a celkovou nábojovou hustotou $\rho(\mathbf{r}, t)$ pomocí Poissonovy rovnice, platí tedy:

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}, t) = 4\pi\rho(\mathbf{r}, t), \quad U(\mathbf{r}, t) = -e\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (1.21)$$

Druhý výraz v (1.21) je definicí potenciálu elektronu $U(\mathbf{r}, t)$ v potenciálovém poli $\varphi(\mathbf{r}, t)$, obdobně je indukovaná nábojová hustota $\rho_{ind}(\mathbf{r}, t)$ úměrná indukované hustotě elektronů $n_{ind}(\mathbf{r}, t)$ s konstantou úměrnosti o velikosti náboje elektronu:

$$en_{ind}(\mathbf{r}, t) = \rho_{ind}(\mathbf{r}, t). \quad (1.22)$$

Zcela analogicky lze zavést nábojovou hustotu utvářející vnější pole $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$ a celkovou nábojovou hustotu $\rho(\mathbf{r}, t)$. Pro další postup je potřeba v této části uváděné vztahy přetransformovat do prostoru vlnových čísel a frekvencí. První rovnici (1.21) tak lze napsat ve tvaru: $\varphi(\mathbf{q}, \omega) = -4\pi\mathbf{q}^{-2}\rho(\mathbf{q}, \omega)$. V rámci přiblížení označované zkratkou RPA (Random Phase Approximation) [49, 53] se zavádí předpoklad, že indukované pole sleduje vývoj (vlnové číslo \mathbf{q}) vnějšího pole a ostatní složky vlnových vektorů indukovaného pole mají náhodný charakter a vzájemně se vyruší. Pak pro nábojovou hustotu ve Fourierově doméně \mathbf{q} a ω platí podobně jako v případě potenciálů vztah: $(\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega))^{-1}\rho_{ext}(\mathbf{q}, \omega) = \rho(\mathbf{q}, \omega)$. Na základě popsaného vychází:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega)} &= \frac{\rho(\mathbf{q}, \omega)}{\rho_{ext}(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{\rho_{ext}(\mathbf{q}, \omega) + \rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{\rho_{ext}(\mathbf{q}, \omega)} = 1 - \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2} \frac{\rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{\varphi_{ext}(\mathbf{q}, \omega)} = \\ &= 1 - \frac{4\pi e}{\mathbf{q}^2} \frac{n_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{\varphi_{ext}(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \frac{n_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{U_{ext}(\mathbf{q}, \omega)}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Při poslední úpravě v (1.23) byla využita druhá z rovností (1.20) avšak pro vnější pole. Využijeme-li dále relaci $U_{ext}(\mathbf{q}, \omega) = \varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega)U(\mathbf{q}, \omega)$ vyplývající z druhé rovnice (1.20) ve Fourierově doméně a (1.18), pak z (1.23) plyne:

$$\frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \frac{\Pi(\mathbf{q}, \omega)}{\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.24)$$

Jednoduchou úpravou (1.24) a s přihlédnutím k vyjádření pro $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ dle (1.18) lze dospět ke konečnému vztahu označovaném jako Lindhardův vzorec permitivity kovu:

$$\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega)^{RPA} = 1 - \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\eta_{\mathbf{k}} - \eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\hbar\omega + E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta}. \quad (1.25)$$

Jak z výše uvedeného vyplývá, pro Lindhardův vzorec byla využita teorie stínění, která zahrnuje vliv skalárního potenciálu, avšak opomíjí vliv vektorového potenciálu \mathbf{A} , jedná se tedy o kvazistatické přiblížení, což dává prostor pro budoucí možná zpřesnění. Této skutečnosti napovídá i časté označení vzorce (1.25) jako longitudinální permitivita. Dále je také možné se zabývat poruchovou teorií vyšších řádů či možnostmi, jak do teorie korektním způsobem zahrnout útlum.

1.5 Permittivita kovu v blízkosti rozhraní

Výhodou Lindhardova vztahu (1.25) je, že dává do souvislosti relativní permitivitu prostředí vůči hustotě elektronů a energii elektronů této hustoty, což není v klasickém Drudeho (Drude-Lorentzově) vzorci obsaženo. Nabízí se tedy tuto přednost využít pro návrh popisu blízkého okolí rozhraní kovové nanostruktury s vnějším prostředím, kde lze očekávat takzvaný „spill out“ jev (tedy vyplivnutí, vyprsknutí elektronu). Předpokládejme, že je nám znám průběh potenciálové energie vytvářející od hrany vodivostního pásu po hladinu označovanou jako výstupní práce elektronu potenciálovou bariéru, jež mu brání dostat se z kovu. Pro zmíněnou bariéru nechť platí: $V_p(-a) = E_c$ a $V_p(a) = U_v$, kde E_c je hrana vodivostního pásu, U_v potenciál elektronu, jehož překročení dovoluje elektronu opustit kov a $2a$ nechť je šířka bariéry v reálném prostoru. Pro permitivitu prostředí v blízkosti rozhraní lze pak dle mého názoru navrhnout vztah v následující obecné podobě:

$$\varepsilon_r(\mathbf{q}, \omega, l) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \int \frac{T_{\mathbf{k}}(E, V_p(l))D_{\mathbf{k}}(E)\eta_{\mathbf{k}} - T_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(E, V_p(l))D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(E)\eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\hbar\omega + E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\gamma} dE. \quad (1.26)$$

Jak je patrné, suma v (1.25) byla v případě vztahu (1.26) nahrazena integrací přes energii elektronu E a tudíž musejí být elektronové hustoty $\eta_{\mathbf{k}}$ a $\eta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ vynásobeny příslušnými hustotami stavů $D_{\mathbf{k}}(E)$ a $D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(E)$. Zbývající funkce $T_{\mathbf{k}}(E, V_p(l))$ a $T_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(E, V_p(l))$ mají význam tunelovací transmisní pravděpodobnosti, tedy, že se elektron s energií $E(\mathbf{k})$ respektive $E(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ dostane v potenciálovém poli $V_p(l)$ do vzdálenosti l od bodu $-a$. Hustotou stavů je myšlena běžně uváděná funkční závislost [54], jež má pro vlnový vektor \mathbf{k} tvar:

$$D_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E(\mathbf{k}))^{1/2}. \quad (1.27)$$

Zcela analogicky jako (1.27) je definována hustota stavů $D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(E)$, v prvním přiblížení se lze domnívat, že efektivní hmotnost m^* bude mít stejnou hodnotu pro obě uvažované hustoty stavů.

Samotná problematika výzkumu a popisu kvantových jevů na rozhraní je velice komplikovanou záležitostí, dle mnohých článků nejsou metody založené na DFT (density functional theory) vzhledem k velké hustotě elektronů v kovu příliš vhodné a jsou proto doposud hledány semi-klasické metody [46]. Na navržený vztah (1.26) lze tak pohlížet jako na jednu z možných alternativních cest modelování kvantově-nelokálních jevů v blízkosti rozhraní. Z uvedeného je tak zřejmá důležitost Lindhardovy teorie a její případná zpřesnění, ale neméně důležité je též určení potenciálu $V_p(l)$ a tunelovací transmisní pravděpodobnosti $T_{\mathbf{k}}(E, V_p(l))$, respektive její analogie v (1.26), tohoto tématu se částečně dotýká navazující část této kapitoly.

1.6 Je v tunelování

Procesy tunelování elektronů představují velmi zajímavou úlohu v oboru plazmoniky. Jednak dochází k tomu, že se elektronová oblaka s nenulovou pravděpodobností dostávají mimo matematicky definovaný povrch kovu, tímto tedy vzniká velice tenká okrajová vrstva obklopující námi zkoumaný objekt kovové nanostruktury s vlastnostmi odlišnými od vnitřku struktury. Zmíněný jev je označován anglickým výrazem „spill out effect“.

Dalším zajímavý případ nastane, pokud jsou dvě metalické nanostruktury natolik blízko sebe, že se elektronová oblaka elektronů na hranicích obou nanostruktur prolnou, což vede

k jevu, kdy se elektrony mohou z jedné nanostruktury dostat do druhé a naopak, jako by byly tyto dva objekty spojeny vodivým materiálem. Nyní tedy lze prostor mezi zkoumanými nanostrukturami považovat za „území“ se specifickými materiálovými vlastnostmi závislými na celé řadě parametrů, jak oněch dvou materiálů kovových nanostruktur, tak na jejich vzájemné vzdálenosti, teplotě a vnějším elektromagnetickým polem.

Popis tunelovacího proudu je v jistých ohledech podobný procesu interakce světla s rovinnou vrstvou, elektronový proud je možné uvažovat jako vlnu, která se může s určitou pravděpodobností odrazit od rozhraní kovové nanostruktury a vakua nebo tímto rozhraním projít. Má tedy smysl zavést pro tunelovací proud transmisní a reflexní koeficienty jako v případě dopadu světla na dielektrickou či kovovou vrstvu. Právě zjištění transmisní pravděpodobnosti elektronů skrz potenciálovou bariéru na rozhraní kovu a vakua bude jedním z důležitých bodů této kapitoly, následným krokem bude snaha zjistit předpis pro samotný tunelovací proud, k čemuž se využijí vztahy před tím určené transmisní pravděpodobnosti. Samotná znalost funkční závislosti tunelovacího proudu na vnějším elektrickém poli a dalších parametrech je dalším stěžejním bodem. Ta totiž může dále posloužit k definici hypotetického vodivého prostředí mezi blízkými kovovými materiály tak, aby bylo možné elegantním způsobem započítat kvantově mechanický efekt tunelování v simulacích interakce kovových nanostruktur založených na standardní elektromagnetické teorii. Tento postup je označován jako takzvaný kvantově korigovaný model (QCM) [35].

Nejprve je však důležité zjistit obecný vztah mezi vlnovou funkcí elektronu a kvantovým proudem, který je vyvolán časově-prostorovými změnami pravděpodobnostního rozložení výskytu elektronu. Výchozí bodem k této snaze je Schrödingerova rovnice a rovnice kontinuity. Kvůli lepší přehlednosti se zde budeme nejprve zabývat 1D případem Schrödingerovy rovnice a u vlnové funkce ψ nebudeme uvádět proměnné x a t . Uvažujme tedy elektron o hmotnosti m v poli potenciálu $V(x)$, pokud Schrödingerovu rovnici přenásobíme zleva komplexně sdruženou vlnovou funkcí elektronu ψ^* , získáme (1.28)

$$i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi^*\psi. \quad (1.28)$$

Obdobně můžeme napsat Schrödingerovu rovnici pro komplexně sdruženou vlnovou funkci ψ^* , a tuto rovnici posléze přenásobíme zleva vlnovou funkcí. Takto obdržíme (1.29)

$$i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi\psi^*. \quad (1.29)$$

Odečtením rovnice (1.29) od (1.28) dostaneme rovnici (1.30), kterou následně bude výhodné upravit do tvaru připomínající rovnici kontinuity

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right). \quad (1.30)$$

Snadno lze ukázat, že platí vztah (1.31), který můžeme dosadit do (1.30). Dále je nutné si uvědomit, že levá strana rovnice (1.30) je časovou parciální derivací vztahu $i\hbar\psi\psi^*$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) = \left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right). \quad (1.31)$$

Nyní je možné rovnici (1.30) s využitím výše popsaných úprav porovnat se standardním tvarem vícerozměrné rovnice kontinuity (1.32)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.32)$$

Za intuitivního předpokladu, který zde nebudeme dokazovat, že lze přejít od parciálních derivací k operátoru gradientu, tedy: $\partial/\partial x \rightarrow \nabla$, je následně možné definovat nábojovou hustotu a proudovou hustotu pomocí vlnové funkce elektronu jako $\rho = i\hbar\psi\psi^*$ a (1.33)

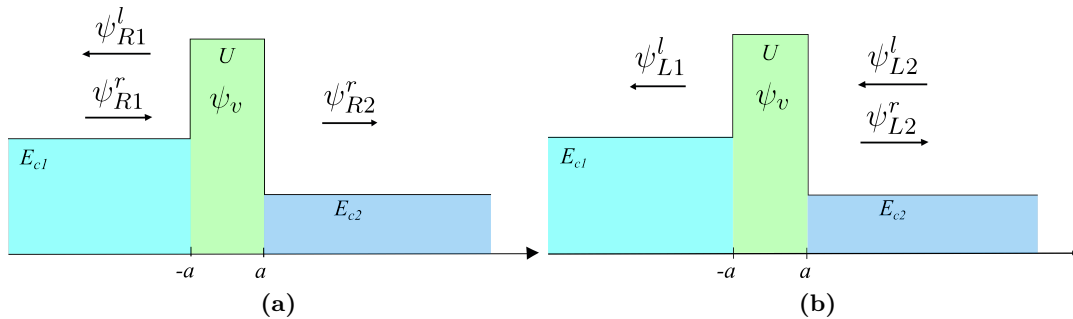
$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi). \quad (1.33)$$

1.6.1 Tunelování elektronu přes potenciálovou bariéru

Záměrem této části je představit mnou navržený jednoduchý analytický model tunelování elektronu přes obdélníkovou potenciálovou bariéru mezi dvěma potenciálovými hladinami. Zde budou ve stručnosti uvedeny pouze základní informace, podrobněji je toto téma rozvedeno v článku [55], z něhož zde mimo jiné vycházíme. Důležitým předpokladem pro popis níže je možnost využití stacionární Schrödingerovy rovnice, tedy přiblížení platné pro zanedbatelně malé časové změny potenciálů. Dále se omezme na nejjednodušší případ v podobě 1D úlohy. Za těchto zjednodušení má stacionární Schrödingerova rovnice tvaru:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_p(x)\psi = E\psi. \quad (1.34)$$

Parametr m^* v (1.34) označuje efektivní hmotnost elektronu. Předpokládejme případ dvou rozdílných kovových materiálů oddělených vakuovou mezerou o takových rozměrech, že může dojít k situaci, že vlnová funkce elektronu prvního materiálu bude zasahovat do prostředí druhého kovu a naopak. Nejprve si můžeme popis zjednodušit tím, že vlastnosti materiálů nahradíme potenciálovým polem, v němž se elektron pohybuje. Pro začátek uvažujme, že se elektron v prvním materiálu nachází na energetické hladině E_{c1} , vakuová mezera představuje potenciálový schod na úroveň U , potenciální energie druhého prostředí má hodnotu E_{c2} . Úlohu můžeme schematicky znázornit obrázkem 1.3.



Obrázek 1.3: Schématické znázornění procesu tunelování elektronu (a) z materiálu 1 do 2, zleva doprava (b) z materiálu 2 do jedna tedy zprava doleva.

Výše uvedenému a na obrázku 1.3 odpovídá potenciálová bariéra, kterou lze v tomto nejjednodušším případě definovat jako pravoúhlý schod mezi jednotlivými úrovněmi potenciálu:

$$V_p(x) = E_{c1}, \quad x < -a, \quad (1.35)$$

$$V_p(x) = U, \quad -a < x < a, \quad (1.36)$$

$$V_p(x) = E_{c2}, \quad x > a. \quad (1.37)$$

Nyní se můžeme zabývat řešením Schrödingerovy rovnice (1.34) v jednotlivých oblastech vyznačených na obrázku 1.3 (a) a (b). Mohou nastat dva případy, první znázorněný 1.3 (a) představuje stav, kdy vlnová funkce elektronu v prvním prostředí popsána funkcemi ψ_{R1}^l a ψ_{R1}^r se v oblasti potenciálové bariéry vakua změni na vlnovou funkci ψ_v . Ve třetím

prostředí může existovat vlnová funkce ψ_{R2}^r . Horní indexy ve zde zavedeném symbolickém značení vlnových funkcí udávají směr šíření vlnové funkce, index r naznačuje směr zleva doprava naopak index l dává informaci o směru zprava doleva. Dolním indexem R nebo L je definována varianta tunelování tedy, zda se jedná o případ 1.3 (a), což je tunelování elektronu z materiálu označené dolním indexem 1 do materiálu vpravo s indexem 2, či tunelování v opačném směru viz obr. 1.3 (b). Předpokládané řešení stacionární Schrödingerovy rovnice v potenciálovém poli $V_p(x)$, odpovídající tunelovacímu procesu na obr. 1.3 (a), lze uvažovat v podobě:

$$\psi(x) = \psi_{R1}^l + \psi_{R1}^r = Ae^{-ik_Lx} + Be^{ik_Lx}, \quad x < -a, \quad (1.38)$$

$$\psi(x) = \psi_v = Ce^{\eta x} + De^{-\eta x}, \quad -a < x < a, \quad (1.39)$$

$$\psi(x) = \psi_{R2}^r = Fe^{ik_Rx}, \quad x > a. \quad (1.40)$$

Symboly A, B, C, D, F mají význam amplitud jednotlivých funkcí tvořící celkové řešení úlohy tunelování dle obr. 1.3 (a). Snadno se lze přesvědčit, že pokud mají být vlnové funkce v (1.38), (1.39) a (1.40) řešením rovnice (1.34), pak pro jednotlivá vlnová čísla k_L, k_R a η platí:

$$k_L = \sqrt{\frac{2m^*(E - E_{c1})}{\hbar^2}}, \quad k_R = \sqrt{\frac{2m^*(E - E_{c2})}{\hbar^2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{2m^*(U - E)}{\hbar^2}}. \quad (1.41)$$

Tunelovací pravděpodobnost T_{LR} je možné definovat jako pravděpodobnost děje přechodu elektronu nacházejícího se na energetické hladině E_{c1} přes území o šířce $2a$ a potenciálu U , jakožto prostředí vakua mezi dvěma kovy, do potenciálového pole druhého kovu na hladinu E_{c2} . Obdobně lze definovat pravděpodobnost T_{RL} vztahující se k procesu tunelování dle obrázku 1.3 (b) zprava doleva. Lze ukázat, že pro obě tunelovací pravděpodobnosti platí následující vztahy:

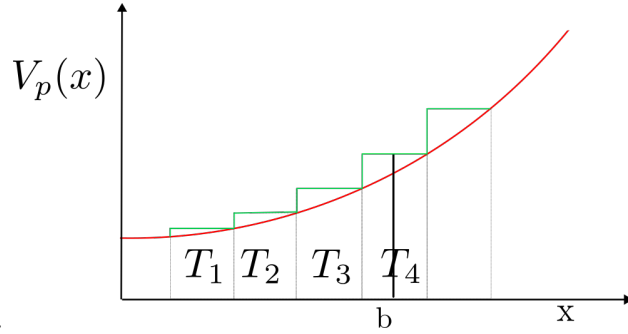
$$T_{LR} = \frac{k_R |F|^2}{k_L |A|^2} = T_{RL} = \frac{k_L |F'|^2}{k_R |A'|^2}, \quad (1.42)$$

kde A' a F' náleží funkcím popisující tunelovací proces dle obr. 1.3 (b). Příslušné amplitudy lze určit z podmínek spojitosti vlnových funkcí včetně jejich derivací v bodech a a $-a$ na okraji potenciálové bariéry. Zde uvedme pouze výsledky:

$$F = \frac{4ik_L\eta e^{-i(k_L+k_R)a} A}{(\eta + ik_L)(\eta + ik_R)e^{-2\eta a} - (\eta - ik_L)(\eta - ik_R)e^{2\eta a}}, \quad (1.43)$$

$$C = F \frac{(\eta + ik_R)}{2\eta} e^{-(\eta - ik_R)a}, \quad D = F \frac{(\eta - ik_R)}{2\eta} e^{(\eta + ik_R)a}. \quad (1.44)$$

Vzorce (1.43) a (1.44) udávají amplitudy vlnových funkcí přes potenciálovou bariéru konečné šířky. Tento výsledek je důležitý pro přibližné vyhodnocení tunelovacího proudu, což bude ukázáno v další části. Vzorce (1.43) a (1.42) jsou však také užitečné pro další úvahy týkající se „spill out“ jevu, konkrétně mnou navrženého vztahu (1.26) v předešlé podkapitole, na což se můžeme nyní v krátkosti zaměřit.



Obrázek 1.4: Schématické znázornění průběhu potenciálu vůči vzdálenosti a jeho diskretizace na ekvidistanční skokové přírůstky.

Otázka tunelování ve směru nárůstu potenciálu a do zvolené vzdálenosti x , jež nemá obdélníkový průběh, je podstatně složitější úloha. Pro první přiblížení navrhuji však následující postup. Uvažíme-li potenciál $V_p(x)$ nyní o obecném (neobdélníkovém) průběhu, pak je možné jej diskretizovat pomocí nekonečného množství infinitezimálně malých přírůstků jak ilustruje obrázek 1.4.

Každý přírůstek můžeme v analogii dle výše uvedeného považovat za potenciálovou bariéru. Celková tunelovací pravděpodobnost $T_c(b)$, že se uvažovaný elektron v potenciálovém poli $V_p(x)$ dostane do vzdálenosti b , je pak přibližně rovna součinu tunelovacích pravděpodobností náležících jednotlivým infinitezimálně malým přírůstkům potenciálu $V_p(x)$. To vyjadřuje vztah níže:

$$T_c(b) = T_1 \cdot T_2 \cdot T_3 \cdot T_4 \dots \quad (1.45)$$

Zvolíme-li si konvenci v souladu s předchozí, tedy počátek nárůstu potenciálu $V_p(x)$ od úrovně hrany vodivostního pásu E_{c1} v bodě o souřadnici $x = -a$, pak (1.45) lze zapsat jako:

$$T_c(b) = T_1(E_{c1} + V_p(-a)) \cdot T_2(E_{c1} + V_p(-a + dx)) \dots \cdot T_n(E_{c1} + V_p(b)). \quad (1.46)$$

Dle mé úvahy je možné pro určení pravděpodobnosti tunelování náležící danému infinitezimálně malému potenciálovému schodu s výhodou využít vztahy (1.38), (1.39) a modifikovaný předpis (1.40) ve tvaru: $\psi(x) = \psi_{R2}^r = F e^{-\eta x}$. Uvažíme-li dále ekvidistanční změnu x -ové souřadnice o dx pro každý přírůstek potenciálu a označíme-li dále myšlený bod x_u na ose x , kde začíná u -tý potenciálový skok, pak pro tunelovací pravděpodobnost vztahenou k tomuto přírůstku potenciálu, můžeme po jednoduché úpravě snadno z (1.42) a (1.43) dojít k vyjádření:

$$T_u(V_p(x_u)) = \frac{2\eta_u}{k_{L,u}} \left| \frac{ik_{L,u}\eta_u e^{-i(k_{L,u}x_u - \eta_u x_u)}}{\eta_u(\eta_u - ik_{L,u})e^{2\eta_u x_u}} \right|^2. \quad (1.47)$$

Přičemž pro nově zavedené veličiny s indexem u pro daný potenciálový schod u platí: $E_u = E - E_{c1} - V_p(x_u)$, $k_{L,u} = \hbar^{-1}(2m^* E_u)^{-1/2}$, $\eta_u = \hbar^{-1}(2m^*(E - E_{c1} - V_p(x_u + dx)))^{-1/2}$, pomocí těchto vztahů a ze znalosti tunelovací pravděpodobnosti patřící u -tému potenciálovému schodu T_u , můžeme dále odvodit tunelovací pravděpodobnost následujícího potenciálového schodu T_{u+dx} :

$$T_{u+dx} = T_u(V_p(x_u) + V_p'(x_u)dx) = T_u(V_p(x_u)) + T_u'(V_p(x_u))V_p'(x_u)dx = T_u(V_p(x_u)) \left(1 + \frac{T_u'(V_p(x_u))}{T_u(V_p(x_u))} V_p'(x_u)dx \right). \quad (1.48)$$

Dalším postupem, konkrétně zlogaritmováním rovnice (1.46) a poté nahrazením nekonečné sumy integrálem a využitím Taylorovy řady logaritmu v 1 do prvního řádu rozvoje, lze dospět k celkové tunelovací pravděpodobnosti, s níž se elektron dostane v potenciálovém poli $V_p(x)$ z bodu a do bodu b :

$$T_c(b) \approx \exp \left\{ \int_{-a}^b \ln \left(T_x(V_p(x)) \frac{T_x'(V_p(x))}{T_x(V_p(x))} V_p'(x) dx \right) \right\}. \quad (1.49)$$

Výsledek (1.49) je podstatný pro určení patřičných tunelovacích pravděpodobností $T_{\mathbf{k}}(V_p(l), E)$, respektive $T_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(V_p(l), E)$ v (1.26) s tím, že $l = b$. Bohužel není potenciál $V_p(x)$ blíže určen a k jeho stanovení bude potřeba další výzkum. Můžeme se však vrátit k pravděpodobnosti tunelování přes obdélníkovou bariéru definovanou vztahy (1.42) a (1.43), jež lze použít alespoň ve zjednodušeném modelu k posouzení tunelovacího jevu, což je předmětem další podkapitoly.

1.6.2 Výpočet tunelovacího proudu

Jak již bylo výše naznačeno, popis povrchových kvantových jevů je komplexní záležitostí, která je doposud předmětem zkoumání. Vzhledem k numerické náročnosti kvantových modelů (DFT a jiné), jež nejsou příliš vhodné pro analýzy velkých systémů, mohou být užitečná i zjednodušená analytická vyjádření s omezenou platností.

Na tomto místě můžeme s výhodou využít výraz (1.42) pro tunelovací pravděpodobnost $T_{LR}(T, E, l)$ z předešlé části kapitoly, a dosadit jej do vztahu pro tunelovací proud dle [13], jež má následující tvar:

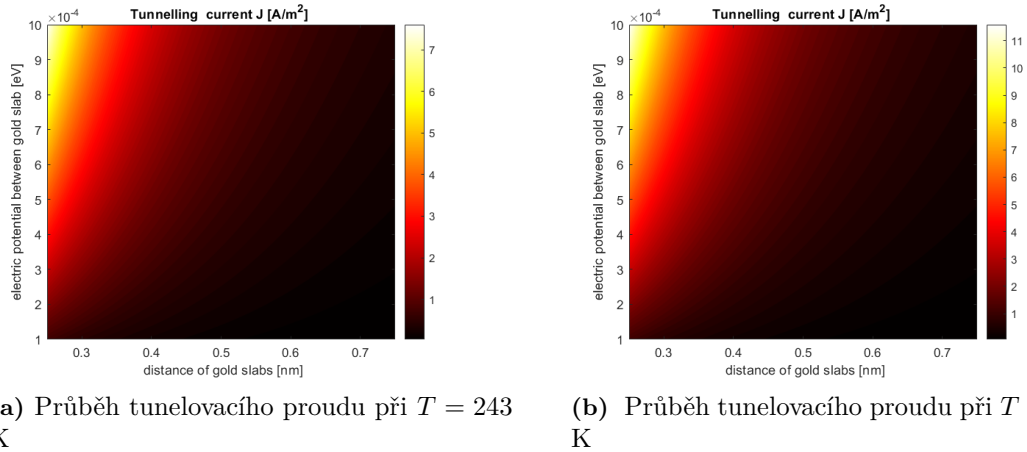
$$\mathbf{J}(l, T) = \frac{k_B T}{2\pi^2} \int_0^\infty T_{LR}(E, l) \ln \left(\frac{1 + e^{(E_F + V_p(l)/2 - E)/k_B T}}{1 + e^{(E_F - V_p(l)/2 - E)/k_B T}} \right) dE \hat{\mathbf{x}}, \quad (1.50)$$

kde $\hat{\mathbf{x}}$ je jednotkový normálový vektor k rozhraní a současně i směr elektrického pole a proudové hustoty a $l = 2a$, viz výše. Tento aproximativní vzorec vychází z předpokladu, že je oblast, kde může docházet k tunelování elektronů, dostatečně úzká, a tak je možné zanedbat zakřivení rozhraní v oblasti tunelování a tudíž považovat potenciálovou funkci $V_p(x)$ za symetrickou.

Ve vztahu (1.50) mají symboly E_F a k_B po řadě význam Fermiho energie a Boltzmanovy konstanty, T je termodynamická teplota v Kelvinech a $V_p(l)$ je celkový elektrický potenciál mezi dvěma kovovými rozhraními oddělených vakuovou mezerou o šířce l .

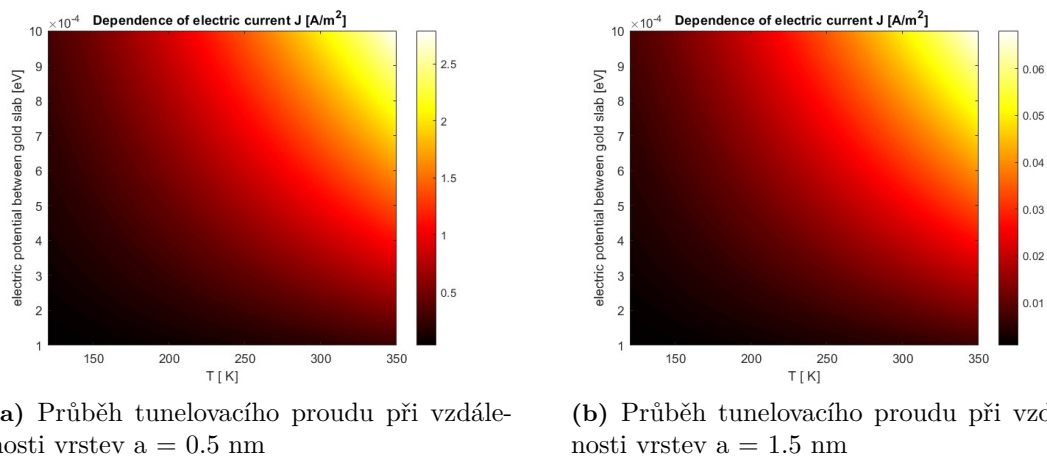
Na základě definice vodivosti $G(T, l) \hat{\mathbf{x}} = (\partial \mathbf{J} / \partial V_p)|_{V_p=0}$, ze zmíněného článku [35], lze z $G(T, l)$ získat statickou vodivost $\sigma_0(l)$ pro níž platí: $\sigma_0(l) = \partial \mathbf{J} / \partial \mathbf{E} = l G(T, l)$. V prvním přiblížení je možné použít aproximaci: $\mathbf{J}(l, \omega) = \sigma_0(l) \mathbf{E}(\omega)$.

Níže jsou uvedeny některé výpočty velikosti tunelovacího proudu, založené na výše nastíněném kvantovém modelu aproximující energetickou bariéru pro tunelující elektron obdélníkovým průběhem potenciálu, mezi zlatými vrstvami oddělenými vakuovou mezerou. Parametry nutné pro výpočty byly převzaty z článku [35] a jejichž konkrétní hodnoty jsou: $E_F - E_{c1} = 0.1\text{eV}$, $m^* = 0.1m_e$, kde m_e je hmotnost elektronu a m^* je jeho efektivní hmotnost.



Obrázek 1.5: Vývoj tunelovacího proudu v závislosti na elektrickém potenciálu a vzdálenosti mezi zlatými vrstvami (a) za teploty 243 K a (b) 300 K.

Výsledná hodnota tunelovacího proudu J je znázorněna na obrázcích 1.5. Z grafů je patrné, že intenzita tunelovacího proudu J se s rostoucí teplotou zvyšuje. Změna intenzity tohoto efektu ovšem není s rostoucí teplotou nijak dramatická. Je logické, že při vyšší teplotě mají elektrony vyšší energii (kinetickou), tudíž mohou snadněji překonat potenciálovou bariéru. Tím se potvrzují intuitivní předpoklady závislosti proudu na teplotě.



Obrázek 1.6: Vývoj tunelovacího proudu mezi zlatými vrstvami v závislosti na elektrickém potenciálu a teplotě při vzájemné vzdálenosti vrstev (a) 0.5 nm a (b) 1.5 nm.

Výsledné hodnoty tunelovacího proudu J jsou zobrazeny na obrázcích 1.6. Oproti průběhům závislosti tunelovacího proudu na teplotě jsou zde vidět značné rozdíly intenzity v závislosti na vzdálenosti vrstev. Z modelu vyplývá, že tunelovací proud strmě roste při přibližování vrstev. I v těchto modelech se potvrzuje původní představa, že tunelovací proud roste se snižující se vzdáleností. Pokud budou vrstvy vzdálenější než přibližně 1,5

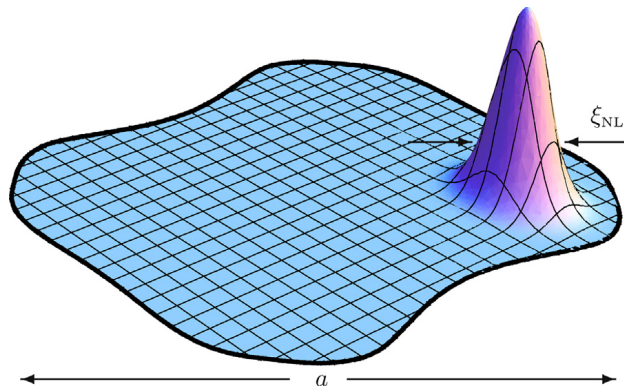
nm, tak už můžeme tento efekt zanedbávat. Při nižších vzdálenostech je jeho vliv nezanedbatelně velký. Pro vykreslení grafu jsme zvolili parametry v rozpětí 0.25 nm až 0.75 nm. Nejmenší vzdálenost byla zvolena z důvodu uvedeného v článku [35]. Vzorec má omezenou platnost z důvodu příliš velkých změn elektrického potenciálu, neboť by nemohlo být pole považováno za homogenní mezi vrstvami. Tento model tedy nelze aplikovat v hodnotách do 0.25 nm.

Nelokální vlastnosti a modely v plazmonice

Na jev označovaným jako nelokální chování se lze dívat mnoha směry, a proto je vhodné se na některé aspekty tohoto efektu podívat blíže. Nebude zde naším cílem studovat časové vývoje procesů, proto je výhodné veškeré vztahy uvádět ve frekvenční doméně ($\partial/\partial t \rightarrow i\omega$) získané Fourierovou transformací. V dalším se též omezíme na popis izotropního (skalárního) prostředí. Jakkoliv může existovat nelokální chování materiálu vzhledem k magnetické indukci, zde se budeme zabývat výhradně nemagnetickými materiály. Tradičně je nelokální chování materiálu v Maxwellových rovnicích matematicky popsáno konvolucí. Tím je vlastně řečeno, jak se elektrické pole ze všech možných míst v objemu myšlené struktury, označených čárkovanou souřadnicí \mathbf{r}' , podílí na velikosti elektrické indukce v bodě \mathbf{r} . Tomu odpovídá rovnice (2.1)

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 \int \varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}'. \quad (2.1)$$

Pokud by materiálová odezva vykazovala jenom lokální odezvu, pak by permitivita mohla být ve tvaru $\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \varepsilon_d(\omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Rozebereme-li z fenomenologického hlediska podobu nelokální permitivity, můžeme získat některé zajímavé informace, které nám pomohou objasnit, co je příčinou nelokálního chování v materiálu. Níže uváděný rozbor nelokální interakce je podrobně popsán v [56] či [57].



Obrázek 2.1: Schematické znázornění funkce $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ v okolí bodu \mathbf{r} , a je charakteristická dimenze, přičemž platí $|\mathbf{k}|a \ll 1$, obrázek je převzat z [56].

Nelokální interakci můžeme považovat jako odchylku od lokální, tudíž je možné nelokální vlastnosti zahrnout do funkce $f(\mathbf{r})$, která by měla mít z fyzikálního hlediska předpokládané vlastnosti, konkrétně že bude krátkodosahová: $\int f(\mathbf{r})d\mathbf{r} \ll \varepsilon_d$, symetrická: $\int \mathbf{r}f(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 0$ a bude pouze korekcí k lokální odezvě materiálu: $\int \mathbf{r}^2f(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 2\xi_{nl}^2$, kde parametr ξ_{nl} označuje dosah nelokální odezvy. Jak je na obrázku 2.1 naznačeno, je tento dosah menší než charakteristická dimenze a . Splněním výše uvedených předpokladů na funkci $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ můžeme provést rozvoj funkce permitivity materiálu ve tvaru (2.2):

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \approx \varepsilon_d(\omega)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (2.2)$$

Provede-li se rozvoj elektrického pole v okolí \mathbf{r} do druhého řádu získáme vztah v podobě (2.3), kde je symbolem $\hat{\mathbf{H}}$ vyjádřen maticový operátor nazývaný Hessián, jenž je maticí obsahující všechny parciální derivace druhého řádu dané funkce.

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \approx \mathbf{E}_i(\mathbf{r}') + \nabla(\mathbf{E}_i(\mathbf{r}'))(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{1}{2}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^T [\hat{\mathbf{H}}\mathbf{E}_i(\mathbf{r}')] (\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.3)$$

Dosazením (2.3) a (2.2) do (2.1), provedením konvoluce s využitím vlastností delta funkce, lze získat z první Maxwellovy rovnice (vyjadřující zobecněný Ampérův zákon) (2.4)

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_d(\omega) + \xi_{nl}^2 \nabla^2) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Výše uvedený vztah je velmi zajímavý z toho hlediska, že přestože vztah (2.2) nevychází z konkrétního fyzikálního modelu (například pro chování elektronového plynu v kovu), ale pouze z předpokladů na „rozumné“ a krátkodosahové působení odezvové funkce $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, lze zjistit jakým způsobem se nelokální chování materiálu projevuje. Podstatné je si všimnout, že nelokální odezva se projevuje až od druhého řádu, tedy operátorem ∇^2 . Na nelokální chování je možné pohlížet i z perspektivy vlnových vektorů, jež jsou svázány vztahy Fourierovy transformace s prostorovými souřadnicemi. Tento pohled je užitečný především ve formulacích obecného popisu nelokálního chování, kde je možné vektor elektrického pole aproximovat rovinnou vlnou. Pro řešení konkrétních úloh je zřejmě výhodnější se přidržet standardní formulace, tedy popisu problému pomocí diferenciálních rovnic. Nicméně je dobré zde uvést i zmiňovaný formalismus popisu ve Fourierovské doméně, neboť přináší nový náhled na danou problematiku a je velmi často v literatuře využíván.

2.1 Nelokální disperze ve Fourierově prostoru vlnových čísel

Jak již bylo výše naznačeno, prostorovou disperzi je možné také definovat jako disperzi funkčně závislou na vlnovém vektoru. Jako příklad nám může posloužit rovnice (2.4), Fourierovou transformací převedena do tvaru (2.5), přičemž symbolem \otimes je označen dyadický součin:

$$-\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_d(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) - \xi_{nl}^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} \otimes \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)). \quad (2.5)$$

Předpokládejme, že je možné řešení rovnice (2.5) hledat ve tvaru šířících se vln. Vektor elektrického pole je možné uvažovat ve dvou různých variantách. Jednak v případě, kdy je vektor elektrického pole orientován ve směru šíření $\mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega) \parallel \mathbf{k}_L$, čili jakožto longitudinální vlnu, jednak kdy je vektor elektrického pole kolmý ke směru šíření, tedy jakožto vlnu transverzální $\mathbf{k}_T \cdot \mathbf{E}_T(\mathbf{k}, \omega) = 0$. Každé z těchto uvažovaných polí má svá vlnová čísla \mathbf{k}_L a \mathbf{k}_T . Tímto rozkladem se rovnice (2.5) rozdělí na dvě rovnice pro transverzální

a longitudinální elektrické pole:

$$\mathbf{k}_T \times \mathbf{k}_T \times \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega) + \frac{\omega^2 \varepsilon_d(\omega)}{c^2(1 - \xi_{nl}^2)} \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega) = 0, \quad (2.6)$$

$$\frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_d(\omega) \mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega) - \xi_{nl}^2 \mathbf{k}_L^2 \mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega)) = 0. \quad (2.7)$$

Pokud se uplatní definice pro transversální pole, tedy že je směr vlnového vektoru kolmý na vektor elektrického pole, pak lze zjistit, že člen s dyadickým součinem v rovnici (2.5) lze upravit na $\mathbf{k}_T \times \mathbf{k}_T \times \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega)$. Takto je možné získat rovnici (2.6), což je vlnová vektorová rovnice. Z vlastností vektorového součinu $\mathbf{k}_T \times \mathbf{k}_T \times \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega) = -\mathbf{k}_T^2 \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega)$ lze dále obdržet vztah pro transversální vlnové číslo (2.8). Podobným postupem lze odvodit vztah (2.9). Z definice longitudinálního pole vyplývá, že vektorový součin v (2.5) je nulový a vzhledem k tomu, že jsou směry longitudinálního elektrického pole a k němu příslušného vlnového vektoru \mathbf{k}_L kolineární, tak je možné dyadický součin v (2.5) nahradit pouze členem $\mathbf{k}_L^2 \mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega)$. Provedením zmíněných úprav lze dospět k rovnici (2.7), „vykrácením“ elektrického pole lze získat rovnici (2.9):

$$\mathbf{k}_T^2 = \frac{\omega^2 \varepsilon_d(\omega)}{c^2(1 - \xi_{nl}^2)}, \quad (2.8)$$

$$\varepsilon_d(\omega) - \xi_{nl}^2 \mathbf{k}_L^2 = 0. \quad (2.9)$$

Z výše uvedených vztahů (2.8) a (2.9) je patrné, že transversální a longitudinální čísla mají jiný předpis. To ale jinými slovy znamená, že materiálová odezva materiálu v podobě permitivity má jinou podobu pro transversální a longitudinální pole, a je možné ji považovat za specifickou vektorovou veličinu.

Na tomto místě je vhodné definovat projektory dle [58], přičemž symbolem \mathbf{I} v (2.10) je myšlena jednotková matice:

$$\mathbf{L}_k \equiv \frac{1}{\|\mathbf{k}_L\|^2} (\mathbf{k}_L \otimes \mathbf{k}_L), \quad \mathbf{T}_k \equiv \mathbf{I} - \mathbf{L}_k. \quad (2.10)$$

Výše uvedené projektory nám umožní rovnici (2.5) převést do tvaru velmi podobnému vektorové vlnové rovnici s lokální odezvou, konkrétně do podoby (2.11), což nám umožní jisté srovnání mezi lokální a nelokální interakcí z pohledu permitivity materiálu:

$$-\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.11)$$

Elektrické pole v (2.11) je celkovým polem, tedy součtem longitudinálního a transversálního pole, což konkrétně znamená: $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega) + \mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega) = \mathbf{T}_k \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) + \mathbf{L}_k \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$. Podobně lze nahlížet na vlnový vektor: $\mathbf{k} = \mathbf{k}_T + \mathbf{k}_L = \mathbf{T}_k \mathbf{k} + \mathbf{L}_k \mathbf{k}$ a taktéž na permitivitu materiálu, což lze zapsat v podobě (2.12)

$$\varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega) + \varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{T}_k \varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega) + \mathbf{L}_k \varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.12)$$

Pokud bychom uvažovali kartézský souřadný systém a šíření elektrického pole ve směru osy $\hat{\mathbf{z}}$, pak transversální směry, v nichž mohou být orientovány jednotlivé složky transversálního elektrického pole, jsou ve směrech os $\hat{\mathbf{x}}$ a $\hat{\mathbf{y}}$. Těto konkrétní konfiguraci pak odpovídá maticový zápis nelokální permitivity materiálu ve tvaru (2.13)

$$\varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Podoba jednotlivých složek matice (2.13), tedy transversální a longitudinální složky permitivity nelokálního materiálu, závisí na konkrétním modelu nelokální interakce. Příkladně-li se však prozatím fenomenologického popisu dle rovnice (2.4) či z ní vyplývající rovnice (2.5), pak ze vztahů (2.6) a (2.7) vycházejí i konkrétní předpisy pro transversální a longitudinální složku nelokální permitivity $\varepsilon_{nl}(\mathbf{k}, \omega)$, a to jako (2.14)

$$\varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\varepsilon_d(\omega)}{(1 - \xi_{nl}^2)}, \quad \varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_d(\omega) - \xi_{nl}^2 \mathbf{k}_L^2. \quad (2.14)$$

Z rovnic (2.6) a (2.7) lze jednoduše odvodit vztahy pro Greenovy funkce pro longitudinální a transversální pole, což umožní převést rovnice do zobecněného tvaru. Jelikož jsou rovnice již přetransformovány do prostoru vlnových vektorů, postačí nulu na pravé straně rovnic nahradit jedničkou a místo $\mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega)$ a $\mathbf{E}_T(\mathbf{k}_T, \omega)$ uvažovat Greenovy funkce $\mathbf{G}_L(\mathbf{k}_L, \omega)$ a $\mathbf{G}_T(\mathbf{k}_T, \omega)$. Jednička na pravé straně vychází z postupu, kdy je v upravené diferenciální rovnici (2.4) nově s nulovou pravou stranou následně nula nahrazena delta funkcí $\delta(\mathbf{r})$. Delta funkce po Fourierově transformaci přejde na zmíněnou jedničku. Platí tedy následující vzorce (2.15)

$$\mathbf{G}_T(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-\mathbf{T}_k}{\mathbf{k}^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega)}, \quad \mathbf{G}_L(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mathbf{L}_k}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (2.15)$$

Přestože byly při odvození vztahů (2.15) využity relace (2.14), jsou vzorce Greenových funkcí obecně platné a vyjadřují důležitý vztah mezi výše definovanými komponentami permitivity nelokálního prostředí.

2.2 Klasifikace optické nelokální disperze

V této části se pokusíme klasifikovat různé případy nelokálních modelů, k čemuž lze výhodně využít obecný maticový tvar pro permitivitu nelokálního prostředí (2.13). Důvod zavedení maticového zápisu vychází z (2.12), tedy z faktu, že šířící se elektrické pole vnímá odlišnou odezvu nelokálního materiálu vzhledem k polarizaci vektoru elektrického pole.

V této části se zaměříme spíše na matematickou stránku problematiky. Z konkrétních příkladů, některých zcela hypotetických, bude patrné, jaké členy řídící diferenciální rovnice pro proudovou hustotu zapříčiňují nelokální charakter longitudinální či transversální komponenty permitivity nelokálního média a z toho vycházející následnou klasifikaci. Jistým přínosem může být i to, že na konkrétních příkladech budou předvedeny postupy, jak lze vcelku jednoduchým způsobem získat longitudinální a transversální komponenty permitivity, tak příslušné longitudinální a transversální vlnové vektory. Nejprve je však vhodné zmínit možné typy odezvy materiálu, jež jsou přehledně uvedeny v tabulce 2.1.

označení typu odezvy	definice	subkapitola
skalární lokální odezva	$\varepsilon_L(\omega) = \varepsilon_T(\omega)$	1.
nelokální odezva s lokální stopou	$\varepsilon_L(\omega) \neq \varepsilon_T(\omega)$	2.
longitudinální nelokální odezva	$\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) \wedge \varepsilon_T(\omega)$	3.
transverzální nelokální odezva	$\varepsilon_L(\omega) \wedge \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega)$	4.
skalární nelokální odezva	$\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega)$	5.
nelokální transversální a longitudinální odezva	$\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) \neq \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega)$	6.

Tabulka 2.1: Tabulka klasifikace možných případů odezvy materiálu

2.2.1 Skalární lokální odezva

Jako model této odezvy lze uvést příklad, kdy je definován lineární vztah mezi proudovou hustotou a elektrickým polem, tedy že indukovaný proud v materiálu svým prostorovým rozložením kopíruje intenzitu elektrického pole. Tento model nebude mít nelokální charakter. Je konkrétně popsán soustavou rovnic (2.16) a (2.17), kde první z rovnic je Maxwelllova. Symbolem $\epsilon_m(\omega)$ je myšlena dielektrická odezva materiálu bez zahrnutí vlivu indukovaného proudu. Druhá rovnice, udávající Ampérův zákon s tím, že platí úměra mezi indukovaným proudem a elektrickým, je dána frekvenčně závislou vodivostí označenou $\sigma(\omega)$. Jak bude později ukázáno, je tento model příkladem lokální odezvy:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_m(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0 \omega \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.16)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.17)$$

Řešení této soustavy hledejme za předpokladu, že může být transverzální elektrické pole v podobě: $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$, kde $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$ představuje vektorovou funkci, jejíž konkrétní tvar může být určen až vyřešením celé úlohy. Zároveň je zapotřebí definovat longitudinální pole a to gradientem skalární funkce $\varphi(\mathbf{r}, \omega)$, tedy vztahem $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \varphi(\mathbf{r}, \omega)$. Zavedení funkcí $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$ a $\varphi(\mathbf{r}, \omega)$ je v jistém smyslu obdobou postupu zavedení vektorového a skalárního potenciálu v klasické elektrodynamice. Dosazením těchto předpokládaných tvarů elektrických polí do soustavy rovnic (2.16) a (2.17) lze velmi snadnými úpravami získat jednu rovnici pro transverzální (2.18) a jednu rovnici pro longitudinální pole (2.19), kde $k_0^2 = \omega^2/c^2$:

$$\mathbf{k}_T^2 \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) - \left(k_0^2 \epsilon_m(\omega) + i\mu_0 \omega \sigma(\omega) \right) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (2.18)$$

$$\left(k_0^2 \epsilon_m(\omega) + i\mu_0 \omega \sigma(\omega) \right) \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.19)$$

Jak je z rovnic (2.18) a (2.19) patrné, uzávorkované výrazy jsou v obou rovnicích stejné, pokud se vykrátí vektor elektrické intenzity $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega)$ z rovnice (2.18), pak dostaneme pro transverzální vlnové číslo vztah $\mathbf{k}_T^2 = k_0^2 \epsilon_m(\omega) + i\mu_0 \omega \sigma(\omega)$. Rovnice (2.19) je vlastně ekvivalentní k rovnici (2.20), neboť je longitudinální elektrické pole kolineární se směrem vlnového vektoru \mathbf{k}_L , a tak je vektorový součin v (2.20) roven nule, což je analogií matematické identity $\nabla \times (\nabla \varphi(\mathbf{r}, \omega)) = 0$.

$$-\mathbf{k}_L \times \mathbf{k}_L \times \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) - \left(k_0^2 \epsilon_m(\omega) + i\mu_0 \omega \sigma(\omega) \right) \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.20)$$

Podobně jako v případě rovnice (2.11) můžeme, jak je na první pohled patrné, převést soustavu rovnic (2.16) a (2.17) do rovnice pro celkové elektrické pole, které je součtem longitudinálního a transverzálního pole, do tvaru (2.21)

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2 \left(\epsilon_m(\omega) + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.21)$$

Poněvadž je tedy možné použít rovnici (2.21) pro pole $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega)$ i pro $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega)$, tak to jinými slovy znamená, že můžeme zavést novou funkci permitivity materiálu. V té už je zahrnut vliv indukované proudové hustoty a jak je evidentní, je tato funkce permitivity pro obě elektrická pole totožná. Platí tedy (2.22)

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_L(\omega) = \epsilon_T(\omega) = \epsilon_m(\omega) + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega}. \quad (2.22)$$

Za zmínku stojí to, že nově zavedenou permitivitu $\varepsilon(\omega)$ není nutné zavádět v maticové podobě právě z toho důvodu, že složky v případném maticovém tvaru mají pro obě pole stejný tvar a tudíž můžeme hovořit o takzvané skalární odezvě. Navíc, jak je též zjevné, tato permitivita $\varepsilon(\omega)$ nevykazuje závislost na vlnovém vektoru a jedná se tedy o první případ dle klasifikace v tabulce 2.1. Přistoupíme-li nyní k dalšímu rozboru úlohy, je možné dojít k poznatkům níže. Z rovnice (2.19) vyplývá, že elektrické pole $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega)$ je nulové, neboť výraz v závorce (2.19) být nulový nemůže, protože je roven \mathbf{k}_T^2 , přičemž předpokládáme, že je transverzální vlnové číslo nenulové, $\nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega) = 0$. Jestliže dále budeme předpokládat platnost bezzdrojové rovnice kontinuity pro proud a indukovaný náboj, má tato rovnice ve frekvenční doméně ($t \rightarrow i\omega$) po Fourierově transformaci tvar: $-i\omega\rho(\mathbf{r}, \omega) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$. Dále je možné využít Maxwellovu rovnici pro indukovaný náboj $\varepsilon_0\varepsilon_m(\omega)\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \rho(\mathbf{r}, \omega)$, z níž je evidentní, že transverzální pole nemá na indukovaný náboj vliv, neboť platí: $\nabla \cdot \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)) = 0$. Dosadíme-li do rovnice kontinuity longitudinální elektrické pole v předpokládaném tvaru, dostaneme Laplaceovu rovnici (2.23) pro $\varphi(\mathbf{r}, \omega)$:

$$\left(\sigma(\omega) - i\omega\varepsilon_0\varepsilon_m(\omega)\right)\Delta\varphi(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.23)$$

Úlohu definovanou rovnicemi (2.16) a (2.17) můžeme tedy označit jako model se skalární lokální odezvou a je možné ji řešit pomocí výše zmíněných funkcí $\varphi(\mathbf{r}, \omega)$ a $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$, nicméně konkrétní tvar řešení je samozřejmě závislý na okrajových podmínkách pro indukovanou proudovou hustotu, na samotné struktuře a dopadajícím elektromagnetickém poli.

2.2.2 Nelokální odezva s lokální stopou

Zde můžeme vycházet z předešlého případu. Velmi jednoduše je možné dospět k závěru, že jediná možnost, jak může nastat varianta definovaná v tabulce 2.1 na druhém řádku, je ta, pokud bude mít druhá rovnice nelokálního modelu dodatečný člen ve tvaru $\xi(\omega)(\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega))$ či v obecnější podobě $\xi(\omega)(\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) + \sigma(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$. V takovém případě mají tedy longitudinální i transverzální složky permitivity odlišný předpis a zároveň nejsou funkčně závislé na vlnovém čísle. Přidržíme-li se druhé obecnější varianty, pak rovnice modelu nabývají podobu (2.24) a (2.25):

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2\varepsilon_m(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.24)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \xi(\omega)(\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)). \quad (2.25)$$

K výše uvedenému modelu lze dojít jednoduchou matematickou úvahou. V rovnici (2.25) musí být za parametrem $\xi(\omega)$ výraz s rotací, neboť pokud by na tomto místě byl nějaký jiný operátor, například Laplaceův Δ , pak bychom po dosazení předpokládaného tvaru pro longitudinální pole ve tvaru $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega)$ zjistili, že longitudinální část permitivity již bude závislá na vlnovém čísle \mathbf{k}_L . Na druhou stranu nemůže následovat za členem $\xi(\omega)$ libovolná mocnina operátoru rotace, nýbrž je přípustná pouze druhá mocnina. To je z podobného důvodu, že je předpokládána pouze frekvenční závislost transverzální části permitivity. Pokud využijeme stejný postup, jako v předchozím případě, tedy že $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$ a $\mathbf{E}_L(\mathbf{k}_L, \omega) = \nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega)$, pak lze jednoduchými úpravami dospět ke vztahu pro transverzální vlnové číslo (2.26):

$$\mathbf{k}_T^2 = k_0^2 \left(\frac{\varepsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}}{1 - i\omega\mu_0\xi(\omega)} \right). \quad (2.26)$$

Rovnice pro longitudinální pole zůstane ve stejném tvaru jako v předchozím případě (2.19). Z uvedeného opět vyplývá, že longitudinální pole může existovat, pokud bude výraz

v závorce v (2.19) roven nule. To by ovšem znamenalo, že je transverzální vlnové číslo (2.26) taktéž nulové. Jinými slovy jak v předešlém, tak v tomto případě může existovat longitudinální pole jen za předpokladu stacionárního nešířivého řešení pro transverzální i longitudinální část elektrického pole. Pro tento uvedený model nelokální odezvy s lokální stopou můžeme najít maticový zápis permitivity, tak jak byl definován dříve, dle orientací jednotlivých složek polí a vztahu (2.12). Pokud bychom brali v potaz méně obecný případ, kdy je $\sigma(\omega) = 0$, je pak evidentní, že i takovýto model bude možné klasifikovat právě jako model nelokální odezvy s lokální stopou (2.27):

$$\epsilon(\omega) = \mathbf{T}_k \epsilon(\omega) + \mathbf{L}_k \epsilon(\omega) = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}}{1 - i\omega\mu_0\xi(\omega)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}}{1 - i\omega\mu_0\xi(\omega)} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_m(\omega) + i\frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

2.2.3 Longitudinální nelokální odezva

V této části zaměřené na rozbor modelů vykazujících nelokální longitudinální odezvu budou zkoumány různé ekvivalentní formy takovýchto modelů, což může být důležité z teoretického i praktického hlediska. Obecně platí fakt, že ne všechny ekvivalentní formulace daného modelu mohou být stejně vhodné pro další uplatnění v numerických či analytických simulacích. Zde proto, i z důvodu klasifikace, je dobré uvést hlavní směry, jakými lze formulovat model s nelokální longitudinální odezvou. Mezi takové patří i klasický hydrodynamický model, jehož odvození lze najít například v [59], a který má tvar soustavy rovnic (4.1) a (4.2). Viz navazující kapitola. K modelu s longitudinální odezvou můžeme v zásadě dospět dvěma různými způsoby, které jsou z matematického hlediska ekvivalentní, jak bude ukázáno. První možností, jak dojít k vhodné formulaci nelokálního modelu s longitudinální odezvou, může být snaha o modifikaci modelu se skalární lokální odezvou daného rovnicemi (2.16) a (2.17). První rovnice (2.16) je vztahem vycházejícím pouze z Maxwellových rovnic, tudíž není možné jakkoliv do této rovnice zasahovat. Druhá rovnice (2.17) vyjadřuje Ohmův zákon, jenž je dobře uplatnitelný na makroskopické úrovni. Na mikroskopické úrovni je však nutné zahrnout vlivy vztahující se k elektromagnetické interakci, kterou vytváří indukovaná proudová hustota, čímž ovlivňuje jednak elektromagnetické pole ve svém okolí, tak i svým polem působí na samotný elektrický proud. Do interakce dále vstupují další aspekty, jako je stlačitelnost elektronového plynu či vzájemná kvantově-mechanická interakce. Zde však můžeme odhlédnout od fyzikální podstaty a zabývat se spíše otázkou samotné existence modelu nelokální longitudinální interakce z matematického hlediska. Jako první možnost předpokládejme, že je dodán do pravé strany rovnice (2.17) člen vytvářející nelokální odezvu jen pro longitudinální pole. K tomuto účelu je velmi výhodné využít již dříve diskutované tvary pro transverzální a longitudinální pole, konkrétně v podobě $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}, \omega)$ a $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega)$. Pokud by tedy pravá strana rovnice (2.17) obsahovala jakýkoliv výraz s operátorem rotace, je pak evidentní, že příspěvek od takového členu by byl pro longitudinální pole nulový, neboť platí operátorová identita $\nabla \times \nabla\varphi(\mathbf{r}, \omega) = 0$. Nabízejí se proto varianty, že na pravé straně rovnice (2.17) může být pouze člen s operátorem $\nabla\nabla\cdot$ či Laplaceův operátor Δ . Druhá možnost, jak bude ukázáno v další podsekcí, nepřichází v úvahu, protože takový člen dává vznik mimo jiné i transverzálně nelokální odezvě. Z tohoto důvodu model, který by vycházel z Ohmova zákona, tedy (2.17) a vykazoval pouze nelokální odezvu pro longitudinální pole, může mít podobu dle rovnic (2.28) a (2.29), kde $\xi_1(\omega)$ je blíže neurčená funkce:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2 \epsilon_m(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.28)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma_1(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \xi_1(\omega) \nabla\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.29)$$

Druhou možností, jak dospět k modelu s nelokální longitudinální interakcí, je naopak modifikovat novým členem levou stranu rovnice (2.17). Opět ze stejných důvodů je vhodný výhradně člen s operátorem $\nabla\nabla\cdot$, tímto způsobem definovaný model má tedy podobu rovnice (2.28) a (2.30):

$$\xi_2(\omega)\nabla\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) + \zeta(\omega)\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) = \sigma_2(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega). \quad (2.30)$$

Rovnice (2.30) má shodný tvar s rovnicí, jež definuje hydrodynamický model ve své standardní verzi. Postačuje k tomu dosadit za $\xi_2(\omega) = \beta^2$, $\zeta(\omega) = \omega(\omega + i\gamma)$ a $\sigma_2(\omega) = i\omega\omega_p^2\epsilon_0$. První rovnice HD modelu je (2.28). Bližší informace o hydrodynamickém modelu budou v následující kapitole. Pro některé úvahy však může být výhodnější pracovat s nelokálním modelem, který by byl právě v podobě rovnic (2.28) a (2.29), namísto soustavy (2.28) a (2.30), neboť jednoduchým dosazením (2.29) do (2.28) vznikne rovnice pro elektrické pole a není nutné již v prvním kroku separátně počítat s transversálním a longitudinálním polem. Takovýto tvar rovnice pro celkové elektrické pole byl odvozen například v [57]. Lze k němu dojít tak, že se vyjádří indukovaná proudová hustota $\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega)$ z (2.28) pomocí elektrického pole a tento vztah je následně dosazen do (2.30). Využitím operátorové algebry a dále po jednoduchých úpravách lze získat kýženou rovnici v podobě (2.31), ze které je již na první pohled evidentní, jak je možné nově definovat indukovaný proud. Porovnáním rovnice (2.28) a (2.31) totiž vyplývá, že indukovaný proud lze definovat též v podobě rovnice (2.29), přičemž se z tohoto srovnání jednoduše dostanou vztahy mezi jednotlivými funkcemi $\sigma_1(\omega)$, $\sigma_2(\omega)$ a $\xi_1(\omega)$, $\xi_2(\omega)$.

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) - k_0^2\epsilon_m(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) = i\mu_0\omega\left(\frac{\sigma_2(\omega)}{\zeta(\omega)} - i\omega\epsilon_0\frac{\xi_2(\omega)}{\zeta(\omega)}\nabla\nabla\cdot\right)\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega). \quad (2.31)$$

Nyní se můžeme zabývat rovnicí (2.31), kterou i z výše uvedeného můžeme chápat nejen jako obecný tvar diferenciální rovnice pro elektrické pole modelu longitudinální nelokální odezvy, ale i z praktického pohledu, že se zároveň jedná o obecný tvar rovnice definovaný hydrodynamickým modelem. Využijeme-li předpoklad o obecném tvaru pro transversální a longitudinální elektrické pole, tedy že $\mathbf{E}_T(\mathbf{r},\omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}(\mathbf{r},\omega)$ a $\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = \nabla\varphi(\mathbf{r},\omega)$ a relaci $\nabla\nabla\cdot\nabla\varphi(\mathbf{r},\omega) = \Delta(\nabla\varphi(\mathbf{r},\omega)) = -\mathbf{k}_L^2\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega)$, pak lze po jednoduchých úpravách získat rovnice pro jednotlivá pole (2.32) a (2.33):

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_T(\mathbf{r},\omega) - k_0^2\left(\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma_2(\omega)}{\epsilon_0\omega\zeta(\omega)}\right)\mathbf{E}_T(\mathbf{r},\omega) = 0, \quad (2.32)$$

$$-k_0^2\left(\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma_2(\omega)}{\epsilon_0\omega\zeta(\omega)} - \frac{\xi_2(\omega)\epsilon_m(\omega)}{\zeta(\omega)}\mathbf{k}_L^2\right)\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = 0. \quad (2.33)$$

Na uzávorkované výrazy v (2.32) a (2.33) můžeme nyní nahlížet jako na nové definice disperzních závislostí permitivity materiálu pro transversální a longitudinální elektrické pole. Na rozdíl od rovnice (2.19) je možné v případě skalární lokální odezvy zajistit nulovou hodnotu závorky v rovnici (2.33) pro jakoukoliv frekvenci ω příslušnou hodnotě velikosti vlnového čísla \mathbf{k}_L :

$$\|\mathbf{k}_L\| = \sqrt{\frac{\zeta(\omega)}{\xi_2(\omega)} + \frac{i\sigma_2(\omega)}{\xi_2(\omega)\epsilon_0\epsilon_m(\omega)\omega}}. \quad (2.34)$$

Z hlediska klasifikace je však zapotřebí zmínit druhou možnost, jíž lze též definovat permitivitu pro longitudinální pole $\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)$, jinak než závorkou v rovnici (2.33). Využijeme-li již mnohokrát zmíněný předpokládaný tvar pro podobu longitudinálního pole, pak z rovnice (2.28) dostáváme vztah mezi longitudinálním elektrickým polem a proudovou hustotou, která je svázána výhradně s tímto polem konkrétně jako

$$-k_0^2\epsilon_m(\omega)\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = i\mu_0\omega\mathbf{J}_L(\mathbf{r},\omega). \quad (2.35)$$

Výraz $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ označuje proudovou hustotu, jejíž směr je shodný se směrem vektoru longitudinálního elektrického pole. Z uvedeného vztahu však okamžitě vyplývá, že jak longitudinální elektrické pole, tak proudová hustota mají stejnou prostorovou závislost a tedy i stejné vlnové číslo. Na základě tohoto tvrzení můžeme jiným způsobem vyjádřit proudovou hustotu $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ pomocí elektrického pole $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega)$ a to z rovnice (2.30) s tím, že platí: $\nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = -\mathbf{k}_L^2 \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$. Následně můžeme touto cestou vyjádřenou proudovou hustotu $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ dosadit do (2.35). Okamžitě tak obdržíme důležitý vztah

$$-k_0^2 \left(\varepsilon_m(\omega) - \frac{i\sigma_2(\omega)}{\varepsilon_0\omega(\zeta(\omega) - \xi_2(\omega)\mathbf{k}_L^2)} \right) \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (2.36)$$

Tímto se v zásadě ukazuje jistá nejednoznačnost, jak definovat disperzní vztah pro permitivitu longitudinálního elektrického pole $\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega)$. Výrazy v závorkách jak v (2.33), tak v (2.36) jsou z matematického hlediska odvozeny správnými postupy a jsou tak v obou případech stejně relevantní jakožto vyjádření disperzního vztahu $\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega)$. Lze též ukázat, že jak z (2.33), tak z (2.36) vyplývá stejný vzorec pro velikost vlnového čísla (2.34). Zmíněná nejednoznačnost by tedy zasloužila patřičnou diskuzi. Do této kategorie odezvy patří QHDM z článku [60, 61].

2.2.4 Transverzální nelokální odezva a další možné typy odezev

Transverzální nelokální odezva je definována vztahem na čtvrtém řádku tabulky 2.1. Zde se můžeme zabývat otázkou, jaký tvar rovnice by zmíněný model musel mít, aby bylo možné jej zařadit dle klasifikace mezi interakci s nelokální transverzální odezvou. Samozřejmě nemá smysl zkoumat všechny nejrůznější typy rovnic, které by mohly takovouto interakci popisovat, ale nabízí se jako vcelku rozumná možnost zkoumat obecnou podobu modelu, který má reálný fyzikální základ a ptát se, zda by jistá modifikace tohoto modelu nevedla právě k nelokální transverzální interakci. K tomuto účelu můžeme využít buď rovnici (2.29) nebo (2.30), které jsou různými variantami obecných formulací rovnic hydrodynamického modelu, jak bylo vysvětleno výše. Dosazením odpovídajících funkčních předpisů za funkce $\xi_2(\omega)$, $\zeta(\omega)$ a $\sigma_2(\omega)$ se pak veškeré níže uvedené úvahy budou týkat konkrétního případu hydrodynamického (HD) modelu. Vyjde-li se tedy z (2.30), což je obecný tvar druhé rovnice HD modelu, můžeme pak uvažovat o její modifikaci například tak, že doplníme pravou stranu rovnice o nový člen obsahující diferenciální operátor působící na celkové elektrické pole. Na začátku této kapitoly o nelokálních vlastnostech a modelech bylo z fenomenologického popisu nelokální interakce odvozeno, že nelokální odezva z matematického hlediska představuje odchylku od klasické teorie projevující se až druhým a vyšším řádem diferencí celkového elektrického pole. Proto se zde budeme zabývat výhradně zmíněným druhým řádem. Rovnici (2.30) můžeme tedy pozměnit zavedením nového členu s diferenciálním operátorem druhého řádu na pravou stranu rovnice. Z celkem zřejmých důvodů nemá smysl uvažovat o operátoru $\nabla \nabla \cdot$, neboť aplikací na transverzální elektrické pole dává nulu. Zbývají tedy již jen dvě možnosti, a to využít člen s $\nabla \times \nabla \times$ a Δ , obě varianty budou níže rozebrány. V prvně navrženém případě nabývá model nelokální interakce podoby rovnic (2.28) a (2.37), kde $\chi(\omega)$ je blíže neurčená funkce závislá jen na proměnné ω :

$$\xi_2(\omega) \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) + \zeta(\omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma_2(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \chi(\omega) \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.37)$$

Rovnici (2.37) lze jednoduchým způsobem upravit tak, že se z (2.28) vyjádří člen $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ a následně je dosazen za nově uvažovaný výraz v (2.37). Po jednoduchých úpravách se takto získá rovnice (2.38), tedy na místo rovnic (2.28) a (2.37) lze zamýšlený model definovat rovnicemi (2.28) a (2.38). To je ale ve své podstatě pořád model nelokální longitudinální odezvy určený rovnicemi (2.28) a (2.30) s jen pozměněnými funkcemi $\zeta(\omega)$

a $\sigma_2(\omega)$. Zbývá se tedy zabývat pouze Laplaceovým operátorem Δ , který dá nenulovou hodnotu jak pro transversální tak longitudinální pole.

$$\xi_2(\omega)\nabla\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) + (\zeta(\omega) - i\mu_0\omega\chi(\omega))\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) = (\sigma_2(\omega) + k_0^2\epsilon_m(\omega)\chi(\omega))\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega). \quad (2.38)$$

Nyní tedy uvažujme model sestávající se ze soustavy rovnic (2.28) a (2.39):

$$\xi_2(\omega)\nabla\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) + \zeta(\omega)\mathbf{J}(\mathbf{r},\omega) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) + \chi(\omega)\Delta\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega). \quad (2.39)$$

Soustavu (2.28) a (2.39) můžeme řešit například vyjádřením proudu pomocí elektrického pole z rovnice (2.28) a tento výraz dosadit za proudovou hustotu v (2.39), čímž se po jednoduchých úpravách dospěje k rovnici (2.40):

$$\begin{aligned} \nabla\times\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) - \frac{\xi_2(\omega)}{\zeta(\omega)}k_0^2\epsilon_m(\omega)\nabla\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) - \left(k_0^2\epsilon_m(\omega) + \frac{i\mu_0\omega\sigma(\omega)}{\zeta(\omega)}\right)\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) \\ - i\mu_0\omega\frac{\chi(\omega)}{\zeta(\omega)}\Delta\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) = 0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Rovnici (2.40) můžeme řešit dosazením předpokládaného tvaru za longitudinální či transversální pole, tedy přesně stejným postupem jako v podkapitole (1.2.3) o longitudinální nelokální odezvě. Tím se získají rovnice (2.41) a (2.42) pro transversální a longitudinální pole:

$$\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_T(\mathbf{r},\omega) - k_0^2\left(\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0\zeta(\omega)} - \frac{i\chi(\omega)}{\omega\epsilon_0\zeta(\omega)}\mathbf{k}_T^2\right)\mathbf{E}_T(\mathbf{r},\omega) = 0, \quad (2.41)$$

$$-k_0^2\left(\epsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0\zeta(\omega)} - \frac{1}{\zeta(\omega)}\left(\xi_2(\omega)\epsilon_m(\omega) + \frac{i\chi(\omega)}{\omega\epsilon_0}\right)\mathbf{k}_L^2\right)\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = 0. \quad (2.42)$$

Jak už byla diskuze vedena v podkapitole výše, lze využít odlišného postupu řešení soustavy rovnic (2.28) a (2.37) tak, že se pro longitudinální elektrické pole nejprve vyjádří vztah pro proudovou hustotu z (2.28). Tento vztah se následně dosadí do (2.37) a za využití jednoduchých, dříve vysvětlených úprav, se vyjádří vztah pro longitudinální složku proudové hustoty $\mathbf{J}_L(\mathbf{r},\omega)$ pomocí $\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega)$. Tento výraz se následně dosadí do rovnice (2.28). Tímto odlišným postupem od prve zmíněného se taktéž získá odlišný vztah od (2.42), konkrétně v podobě

$$-k_0^2\left(\epsilon_m(\omega) - \frac{i\chi(\omega)}{\omega\epsilon_0\xi_2(\omega)} - \frac{i}{\omega\epsilon_0\xi_2(\omega)}\left(\frac{\sigma(\omega)\xi_2(\omega) - \chi(\omega)\zeta(\omega)}{\zeta(\omega) - \xi_2(\omega)\mathbf{k}_L^2}\right)\right)\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = 0. \quad (2.43)$$

Opět jako v předešlé podkapitole je možné definovat longitudinální část permitivity $\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)$ buď výrazem v závorce (2.42), nebo v (2.43). Nyní se konečně můžeme dostat k otázce existence transversální nelokální odezvy definované ve čtvrtém řádku tabulky 2.1, kterou lze pohodlně zodpovědět pohledem na (2.42). Pokud bude $\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)$ funkcí závislou jen na ω a zároveň se tím u $\epsilon_T(\mathbf{k},\omega)$ nevyruší závislost na vlnovém čísle, pak tím získáváme podmínku pro existenci transversální nelokální odezvy. Z (2.42) ihned získáme zmíněnou podmínku v podobě

$$\xi_2(\omega)\epsilon_m(\omega) + \frac{i\chi(\omega)}{\omega\epsilon_0} = 0. \quad (2.44)$$

Podmínka (2.44) tedy zaručuje existenci nelokálního chování pouze pro transversální pole. Otázkou však je, zda-li se nejedná pouze o matematický model. Podle [56] by se však mohlo jednat o popis nelokální odezvy pro polovodičové materiály s nízkou mírou dopování.

Skalární nelokální odezva

Skalární nelokální odezva je matematicky definována pátým řádkem v tabulky 2.1. Jedná se tedy o případ, kdy jak transverzální, tak longitudinální část permitivity jsou funkčně závislé na vlnových vektorech \mathbf{k}_T a \mathbf{k}_L . Přitom platí, že funkční předpis obou částí permitivity je shodný. V předchozí podkapitole byla řešena otázka existence transverzální nelokální odezvy, přičemž bylo ukázáno, jakým způsobem lze modifikovat standardní formulaci hydrodynamického modelu, která by zapříčinila nelokální odezvu pro transverzální pole. Samozřejmě je dobré upozornit, že se nejednalo o zcela obecný rozbor, neboť byla uvažována pouze modifikace pravé strany rovnice (2.30). Nicméně pokud budeme vycházet z rozboru v předchozí podkapitole, pak máme v podstatě otázku existence skalární nelokální odezvy vyřešenou. Stačí k tomu pouze porovnat uzávorkované výrazy v rovnicích (2.41), (2.42) a hledat podmínky, za nichž budou mít stejný funkční předpis. Okamžitě je tedy jasné, že k tomu dojde, pokud bude funkce $\xi_2(\omega)$ nulová. Model skalární nelokální odezvy má tedy tvar v podobě rovnic (2.45), (2.46):

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2 \varepsilon_m(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0 \omega \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.45)$$

$$\zeta(\omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \chi(\omega) \Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.46)$$

V obou případech jak pro longitudinální, tak transverzální pole bude permitivita dána funkčním předpisem (2.47), kde vlnová čísla pro transverzální a longitudinální elektrické pole budou mít jinou disperzní závislost:

$$\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_T(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_m(\omega) + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega \varepsilon_0 \zeta(\omega)} - \frac{i\chi(\omega)}{\omega \varepsilon_0 \zeta(\omega)} \mathbf{k}^2. \quad (2.47)$$

Do této kategorie odezvy patří CF-HDM (curl-free hydrodynamic model) z článku [60,62].

Transverzální a longitudinální nelokální odezva

Tento případ je dán modelem definovaný rovnicemi (2.28) a (2.39), přičemž zde nejsou kladeny žádné další požadavky na $\xi_2(\omega)$ a $\chi(\omega)$.

V této kapitole uváděné modely vycházejí z makroskopického pohledu na interakci a získaná řešení, například rozložení polí, se týkají celé interagující struktury, která je s okolním prostředím svázána okrajovými podmínkami na své hranici. Pro bližší mikroskopický pohled na nelokální interakci je možné využít aparát zobecněných funkcí a všechny vztahy na tomto základě predefinovat. Jak už bylo zmíněno, takovýto přístup je na druhou stranu nepraktický pro analýzu interakce z makroskopického pohledu, neboť vyvstanou obtíže se zavedením okrajových podmínek a hledáním řešení takto formulované úlohy. Naproti tomu pro zaměření se na mikroskopickou úroveň, kde není zapotřebí se zabývat okrajovými podmínkami, kde je hlavním cílem se dopátrat materiálové odezvy, je formulace problému v prostoru vlnových čísel či zobecněných funkcí užitečnou.

Velice zajímavou cestou popisu materiálu a jeho vlastností představuje také kvantově-mechanický pohled na volný elektronový plyn. Této problematice se věnovali fyzikové již v 50. letech minulého století. Stěžejní prací je v tomto ohledu odvození vztahu pro dielektrickou funkci permitivity kovu či silně dopovaného polovodičového materiálu označovanou jako Lindhardova dielektrická funkce. Odvození zmíněného vztahu je možné několika odlišnými postupy a taktéž konečný vzorec je uváděn v několika rozdílných tvarech. Zde jej pouze ukážeme dle [63] v podobě (2.48) a to bez hlubších souvislostí, na jejichž základě je možné k tomuto vztahu dospět.

$$\varepsilon_{Ln}(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_\infty - V(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k}) - \hbar(\omega + i\gamma_L)}. \quad (2.48)$$

Ve vzorci (2.48) představuje funkce $V(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/\mathbf{q}^2$ Fourierovu transformaci Coulombova potenciálu, $f(\mathbf{k})$ je Fermi-Diracova distribuční funkce a výraz $E(\mathbf{k})$ označuje energii elektronu o vlnovém čísle \mathbf{k} , které odpovídá Fermiho energetické hladině. Poslední veličinou γ_L je fenomenologicky zavedená kladná útlumová konstanta. Nové proměnné $f(\mathbf{q})$ byly získány Fourierovou transformací prostorových souřadnic $f(\mathbf{q})$ a mají význam odchylky vlnového čísla od Fermiho hladiny. Jinými slovy je tak vyjádřen přechod do excitovaného stavu elektronu. Z Lindhardovy teorie [64] vyplývá, že distribuční funkce $f(\mathbf{k})$ je závislá na elektrickém poli uvnitř kovu a tudíž je odlišná v případě longitudinálního a transverzálního pole. Dále platí, že se dá čitatel v sumě v (2.48) nahradit výrazem $f(\mathbf{k})(E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k}))$. Vzorec (2.48) je možné dále aproximovat pro dlouhé vlnové délky, pak $\mathbf{q} \rightarrow 0$ a člen $E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})$ je možné vzhledem k ostatním členům ve jmenovateli zanedbat. Nahradí-li se poté suma za integrál ve sférických souřadnicích tak, aby bylo možné zahrnout všechny kombinace vzájemného úhlu mezi vektory \mathbf{k} a \mathbf{q} a jejich velikostí, pak po určitých úpravách lze získat vzorec (2.49), který je obdobou Drudeho modelu kovu:

$$\epsilon_{Ln}(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_{pl}^2}{(\omega + i\gamma_L)^2}. \quad (2.49)$$

Parametr ω_{pl} v (2.49) je plazmová frekvence, ta je definována vztahem: $\omega_{pl} = \frac{4\pi n e^2}{m^*}$, kde e je náboj elektronu, n elektronová hustota a m^* má význam efektivní hmotnosti elektronu v pásové struktuře kovu. Pokud by se tedy vlastnosti kovu daly abstrahovat výhradně chováním volného elektronového plynu, pak z kvantové teorie vyplývá, že by se nelokální chování materiálu mělo objevovat a zesilovat se zmenšující se vlnovou délkou. Samotná hranice vlnových délek od níž by se dalo dané médium považovat za nelokální ale není přímo stanovena.

Výše uvedený příklad poukazuje na souvislosti mezi nelokální interakcí a ději v elektronovém plynu na kvantové úrovni z poněkud odlišného pohledu, než z kterého vychází HDM, kde je prioritně řešena otázka interakce elektronového plynu a EM pole z makroskopického pohledu. V další části jsou v náznaku zmíněny některé další kvantové jevy. Do této kategorie odezvy patří SF model z článku [60, 65].

Standardní hydrodynamický model a některé jeho modifikace

Nelokální odezvu materiálu lze obecně popsat tak, že vlastnosti materiálu v uvažovaném bodě prostoru jsou ovlivňovány také fyzikálními veličinami v jeho okolí. Prostorová odezva materiálu tedy není delta funkcí, což ve Fourierově prostoru vlnových čísel znamená, že vlastnosti materiálu jsou funkcemi těchto vlnových čísel. Model HD je založen na myšlence, že je možné popsat dynamiku elektronového plynu podobně jako u kapaliny s nenulovou stlačitelností. V důsledku toho lze HDM chápat jako sofistikovanější Drude-Lorentzův model v tom smyslu, že elektronový plyn se pohybuje na kladně nabitém pozadí kovových iontů. Tyto ionty tvoří dielektrickou část permitivity kovu a zbývající permitivita je generována reakcí na hustotu excitovaného proudu. Součet těchto dvou permitivit udává jednak permitivitu kovu pro transverzální (příčné) elektromagnetické pole, jednak longitudinální (podélnou) permitivitu pro longitudinální pole. Z hlediska klasické teorie, která bere v úvahu pouze transverzální elektromagnetické pole, lze existenci longitudinálního pole a longitudinální složky permitivity chápat jako nelokální odezvu [66]. Existence nelokální odezvy byla očekávána především u lokalizovaných nanostruktur, a proto byla tímto směrem zaměřena velká pozornost. Pro zjednodušení výpočtů byly zkoumány i některé aproximace standardního HD modelu, jako je kvazistatická aproximace, a to především z důvodu, že takovýto popis dává nefyzikální předpověď existence nových rezonancí pod plazmovou frekvencí [67]. Ty však mohou vést k nepřesným výpočtům, například k novým neočekávaným rezonancím pod plazmovou frekvencí. Hydrodynamický model ve své linearizované podobě [59] je tedy osvědčeným nástrojem pro popis nelokální interakce v kovových prostředích. Kombinuje Maxwellovy rovnice a zároveň dynamiku elektronového plynu v elektrickém poli. Současně se chování elektronového plynu podobá kapalině, splňuje rovnici kontinuity a má nenulovou stlačitelnost.

3.1 Linearizovaná forma hydrodynamického modelu

Standardní podoba hydrodynamického modelu je definována následujícím souborem dvou rovnic

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_b(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3.1)$$

$$\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma) \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.2)$$

Symbol $\varepsilon_b(\omega)$ v HDM znamená permitivitu kladného kovového pozadí. V následující tabulce 3.1 jsou uvedeny parametry HDM pro materiály zlato a stříbro [57, 59], které se

používají při výpočtech v dalších částech této práce. Řešení hydrodynamického modelu

Tabulka 3.1: Tabulka parametrů standardního HDM. Zde v_F je Fermiho rychlost, ω_p je frekvence plazmatu, β je nelokální konstanta a γ je útlumová konstanta.

konstanta	jednotky	zlato	stříbro
v_F	$10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	1.39	1.39
ω_p	10^{16} Hz	1.3673	1.3627
β	$10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	$0.7745 \cdot v_F$	$0.7745 \cdot v_F$
γ	10^{16} Hz	$\omega_p/127$	$\omega_p/360$

bylo hledáno různými způsoby, kupříkladu jako jeden z možných postupů bylo využití Maxwellových rovnic ve Fourierově obraze, do kterých se dosadí vztahy pro nelokální permitivitu materiálu odvozené z HDM. Takto získané rovnice je možné Fourierovsky přetransformovat z prostoru vlnových čísel a frekvencí do běžných prostoro-časových proměnných a tím získat vhodné diferenciální rovnice popisující nelokální interakci [68]. Ukazuje se však, že obdobné postupy narážejí na mnohé numerické problémy. Obecně můžeme předpokládat, že celková proudová hustota je součtem transverzální a longitudinální složky, ale pro zjednodušení uvažujme pouze čistě transverzální složku $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}_E(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{J}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{\eta}_J(\mathbf{r}, \omega)$, nebo pouze čistě longitudinální pole $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \xi_E(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \xi_J(\mathbf{r}, \omega)$. Na základě těchto předpokladů lze po jednoduchých algebraických manipulacích získat výrazy pro transverzální a longitudinální vlnové číslo (3.3) a (3.4)

$$k_T = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_b(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_m(\omega)}, \quad (3.3)$$

$$k_L = \frac{1}{\beta} \sqrt{\omega(\omega + i\gamma) - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_b(\omega)}}. \quad (3.4)$$

V rovnicích (3.3) a (3.4) jsme zavedli následující zápis: $\sqrt{k_{T,y}^2 + k_{T,z}^2} = \|\mathbf{k}_T\| \equiv k_T$, podobně $\|\mathbf{k}_L\| \equiv k_L$ a $\|\mathbf{k}_0\| \equiv k_0$. V rovnici (3.3) $\varepsilon_m(\omega)$ odpovídá permitivitě materiálu, takže transverzální vlnové číslo má stejnou hodnotu jako klasicky definované vlnové číslo standardní permitivity. Definujeme-li nyní vodivost zvlášť pro transverzální a zvlášť pro longitudinální pole pomocí vztahů $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\mathbf{r}, \omega) * \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$, kde symbol $*$ znamená konvoluci přes prostorové proměnné, můžeme z rovnice (3.2) zjistit následující vztahy ve Fourierově prostoru

$$\sigma_T(\omega) = \frac{i\varepsilon_0\omega\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3.5)$$

$$\sigma_L(\omega, k_L) = \frac{i\varepsilon_0\omega\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma) - \beta^2 k_L^2}. \quad (3.6)$$

Podobně je možné definovat nelokální vzorce pro permitivitu. Rovnici (3.1) můžeme upravit tak, že její pravou stranu převedeme na levou a použijeme vztahy pro vodivost, čímž získáme nové vztahy pro longitudinální a transverzální permitivitu jako (3.7) a (3.8)

$$\varepsilon_T(\omega) = \varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_b(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_L(\omega, k_L) = \varepsilon_b(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma) - \beta^2 k_L^2} = 0. \quad (3.8)$$

Současně lze ukázat, že hodnota $\varepsilon_L(\omega, k_L)$ je nulová [58], protože longitudinální vlnové číslo je funkcí frekvence a vlnové číslo nemůžeme považovat za nezávislou veličinu. Původem nelokální odezvy je existence longitudinálního pole, což je zřejmé z rovnice (3.6).

Další modifikace jsou uvedeny například v [60]. Jak bylo zde již několikrát poukázáno, nelokální modely jsou jakýmsi mezistupněm popisu mezi klasickým a kvantovým. Nelokální modely by měly v sobě zahrnovat i hrubé obrysy kvantových procesů, jejichž přesná analýza je velice obtížná. Jistou aproximací dějů vycházející z kvantové úrovně lze nalézt v klasickém HDM v pohybové rovnici proudové hustoty. Člen $\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$ v (2.30), či viz běžně uváděný tvar HDM (4.2) v navazující kapitole, obsahuje vlastnosti stlačitelnosti „kvantového tlaku“ elektronového plynu a případně i difúze (GNOR modifikace [13]) pokud $\beta^2 \rightarrow \beta^2 + D(\gamma - i\omega)$. Parametr D zde určuje míru difúznosti elektronového plynu z oblasti s vysokou hustotou do prostoru s nižší koncentrací. Je pochopitelné, že oba parametry β a D ovlivňují rozložení povrchového náboje na okraji struktury.

3.2 Dvou složkový HDM

Podobně jako v případě kovů, je snahou popsat nelokální vlastnosti i u dalších materiálů. V nedávné době byl navržen HDM pro polovodičové materiály a též byly i experimentálně ověřeny charakteristické rezonanční vlastnosti předpovídané HD modelem [69]. Vzhledem k tomu, že polovodiče mají obecně nižší koncentraci nosičů náboje v porovnání s kovy, je jejich plazmová frekvence nižší. Kvůli nižším plazmovým frekvencím budou nelokální efekty obecně pozorovatelné na větších polovodičových strukturách než v kovových. To může být výhodné z hlediska experimentálního ověřování navrhovaných HD modelů, neboť příprava nanostruktur větších rozměrů je podstatně snazší.

Standardní HDM umožňuje popis pouze jednoho typu nosičů náboje (elektrony/díry). Obvykle se do výpočtů zahrnují pouze elektrony, což je rozumné přiblížení, protože elektrony jsou přítomny jako většinové nosiče a navíc jejich menší efektivní hmotnost ve srovnání s dírami způsobuje, že ovlivňují optické vlastnosti více. Zanedbáním proudových hustot kladných nosičů náboje se nutně projeví tím, že rezonanční křivky nebudou obsahovat akustickou rezonanční složku. Aby byl odstraněn tento nedostatek, byl navržen dvousložkový model. Ten dále rozšiřuje HDM teorii, v tomto modelu jsou vytvořeny dvě různé větve rezonancí (optické a akustické) závislé na vlastnostech elektron-děrového plazmatu. V tomto modelu tak uvidíme i přítomnost rezonancí akustického plazmonu. Dle článku [70] je podoba dvousložkového HDM následující:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\infty \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0(\mathbf{J}_a(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{J}_b(\mathbf{r}, \omega)), \quad (3.9)$$

$$\beta_a^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_a(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma_a) \mathbf{J}_a(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_a^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3.10)$$

$$\beta_b^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_b(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma_b) \mathbf{J}_b(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_b^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.11)$$

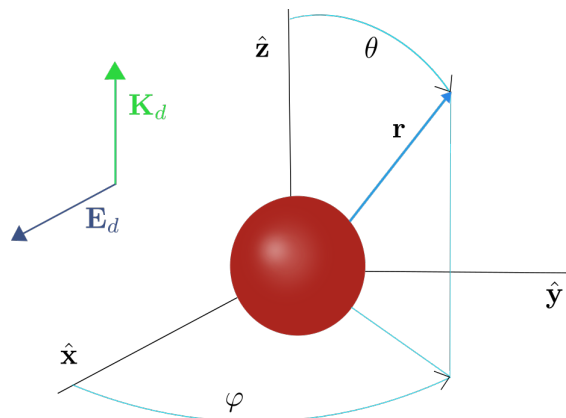
V modelu definovaném rovnicemi (3.9), (3.10), (3.11) představuje veličina \mathbf{J}_a proudovou hustotu elektronového plynu a \mathbf{J}_b proudovou hustotu děr. Každá ze složek nosičů náboje s jak s indexem (a) tak (b) má své parametry analogické standardnímu HD modelu, pro něž však platí odlišné vztahy:

$$\beta_i^2 = \frac{3k_B T}{m_i^*}, \quad \omega_i^2 = \frac{e^2 n_i}{\varepsilon_0 m_i^*}, \quad \gamma_i = e(m_{i,cd}^* \mu_i)^{-1}. \quad (3.12)$$

Index i v (3.12) souhrnně označuje indexy a a b , parametr m_i^* má význam efektivní hmotnosti spjaté s hustotou stavů a $m_{i,cd}^*$ hmotnost daného nosiče náboje ve vodivostního pásu. Symbolem k_B je označena Boltzmannova konstanta a veličina T je termodynamickou teplotou.

Hydrodynamický model sférické kovové částice

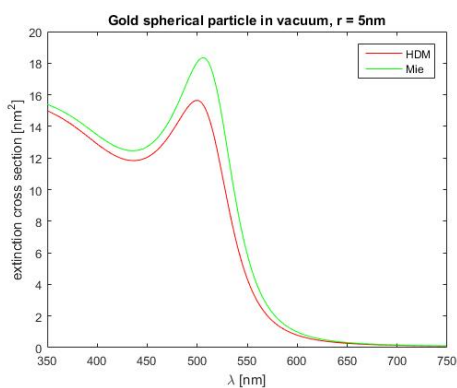
Tato kapitola pojednává především o řešení úlohy interakce dopadající rovinné elektromagnetické vlny se sférickou kovovou částicí, přičemž rovnice interakce budou dány klasickým HD modelem. Interakci si můžeme představit tak, jak je vyobrazena na obrázku 4.1.



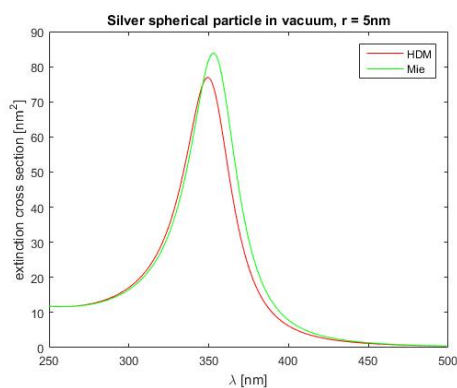
Obrázek 4.1: Grafická představa kovové sférické částice a dopadající rovinné vlny o vlnovém vektoru k_{inc} a vektoru a intenzity elektrického pole E_{inc} , kartézská soustava souřadnic je definována osami $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$. Poloha bodu ve sférických souřadnicích je určena úhly θ, φ a vzdáleností bodu od počátku souřadnicové soustavy r .

Úloha interakce rovinné vlny s kovovou částicí je jednou z mála úloh, pro které lze nalézt analytické řešení. Další takovou úlohu představuje interakce s nekonečnou kovovou vrstvou o konečné tloušťce, jejíž řešení bude ukázáno v následující kapitole. Problém rozptylu rovinné vlny na sférické částici byl poprvé úspěšně vyřešen již v roce 1908 a celý koncept řešení je označován jako Mieho teorie [2]. Výsledky této teorie velmi dobře souhlasily s experimenty, nicméně z fyzikálního hlediska jeví tato teorie jisté nedostatky, především z toho důvodu, že blíže nezohledňuje vnitřní procesy spojené předně s indukovanou proudovou hustotou v kovu. Z pohledu Mieho teorie jsou tyto vnitřní procesy již zahrnuty v permitivitě kovu, respektive v naměřených datech frekvenční odezvy permitivity kovu. Jak se však ukazuje, čím více se blíží rozměry částice volné dráze elektronu uvnitř kovu, tím více bude samotná indukovaná proudová hustota ovlivněna hranicemi kovové částice a začnou se projevovat jevy, které nejdou klasickou teorií předpovídat. Mieho teorie však

z matematického hlediska nabízí inspiraci, jak řešit interakci sférické částice s rovinnou vlnou v nelokálním případě. Jakkoliv je Mieho teorie zásadní, zde se omezíme pouze na stručný slovní popis. Některé technické detaily vyplynou z dalších subkapitol věnovaných HD modelu, které vycházejí právě z postupů Mieho teorie. Princip řešení interakce podle Mieho teorie je takový, že se provede rozvoj dopadající rovinné vlny, rozptýleného pole a taktéž pole uvnitř částice do lichých a sudých vektorových sférických funkcí dvou k sobě ortogonálních typů. Poněvadž je částice sférická, tak je evidentní, že řešení úlohy nebude závislé na polarizaci dopadající vlny, respektive všechna řešení jsou spolu svázána pouze transformačními vztahy mezi zvolenými souřadnými systémy, v nichž jsou definovány poloha částice a dopadající rovinná vlna. Vnější pole mimo částici mají vlnové číslo $k_0 = \omega/c\sqrt{\varepsilon_0(\omega)}$, zatímco pro pole uvnitř částice je $k_m = \omega/c\sqrt{\varepsilon_m(\omega)}$, přičemž $\varepsilon_0(\omega)$ a $\varepsilon_m(\omega)$ jsou permitivity vnějšího prostředí a kovu částice. Další zásadní odlišností je tvar radiální funkce těchto tří polí, dopadající vlna a pole uvnitř částice obsahují Besselovu funkci, naproti tomu rozptýlené pole má Hankelovu funkci. Řád obou funkcí odpovídá řádu rozvoje rovinné vlny. Jednotlivé koeficienty rozvoje rozptýleného a vnitřního pole v částici se odvodí z Maxwellových okrajových podmínek spojitosti tečných složek elektrického a magnetického pole na rozhraní částice. Rozdíly mezi klasickým přístupem v podobě Mieho teorie a nelokálním dle HD modelu lze ilustrovat obrázkem 4.2, kde jsou výpočty účinných průřezů extinkce vzhledem k vlnové délce dopadající rovinné vlny.



(a) účinný průřez extinkce zlaté částice



(b) účinný průřez extinkce stříbrné částice

Obrázek 4.2: Účinný průřez extinkce zlaté (a) a stříbrné (b) sférické částice o průměru 10 nm ve vakuu při interakci s dopadající rovinnou vlnou.

Z obrázku 4.2 je možné si utvořit představu, jak se projeví nelokální interakce, což je důsledek vybuzení toků proudové hustoty v objemu kovové částice, které nejsou Mieho teorií zohledněny. Zásadní roli zde ale hraje geometrie interagujícího objektu s dopadající vlnou, proto není možné zde učiněné závěry zobecnit na jiné situace. Jak je tedy z obr. 4.2 v obou variantách jak zlaté, tak stříbrné částice o poloměru 5 nm vidět, HD model oproti Mieho teorii předpovídá o něco nižší extinkci hlavně v okolí rezonance a její posuv ke kratším vlnovým délkám. Konkrétní údaje o modrém posuvu jsou následující, v případě zlaté částice se rezonanční vlnová délka určená Mieho teorií posouvá z 505.9 nm k 500.3 nm dle HDM, pro stříbrnou částici je možné určit posuv z 352.8 nm k 349.8 nm. Jak je tedy vidět, rozdíly mezi vypočtenými údaji o extinkci oběma přístupy nejsou dramatické, ale také nezanedbatelné. Lze též odvodit, že na menších strukturách se nelokální jevy budou projevovat významněji, není tedy od věci se podívat na řešení HD modelu specificky ve sférických souřadnicích blíže.

4.1 Řešení hydrodynamického modelu ve sférických souřadnicích

Pokusme se nyní řešit naši úlohu podobně, jako tomu bylo v případě Mieho teorie, nejprve je však nutné definovat rovnice HD modelu, na jejichž základě bude založen celý další popis. Hydrodynamický model je běžně uváděn ve tvaru rovnic (4.1) a (4.2), takto definovaný model lze najít například v [71]. Jak si lze všimnout, v (4.1) nevystupuje přímo permitivita daného kovu, ale výraz $\varepsilon_b(\omega)$, který má význam odezvy pouze iontového pozadí kovu, a tedy nejsou do této funkce zahrnuty vlastnosti volného elektronového plynu, jedná se tedy o dielektrickou část permitivity kovu, která je uváděna předpisem: $\varepsilon_b(\omega) = \varepsilon_m(\omega) + \omega_p^2/\omega(\omega + i\gamma)$. První člen v rovnici (4.2) má význam tlaku elektronového plynu a je důsledkem existence jeho vnitřní energie. Parametr β je definován pomocí Fermiho rychlosti v_F a to vztahem: $\beta^2 = 3/5v_F^2$. Dalšími parametry HDM jsou plazmová frekvence ω_p a útlumová konstanta γ . Zde se můžeme pokusit hledat řešení HD modelu, lze využít postupů uvedených v předešlé kapitole v podkapitole o nelokální longitudinální odezvě, kam lze HD model zařadit, ale namísto toho je možné uvést i poněkud odlišný postup, nabízející trochu názornější vhléd na HD model z fyzikálního hlediska, který je však po matematické stránce analogický s operacemi v předchozí kapitole.

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - k_0^2 \varepsilon_b(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega). \quad (4.1)$$

$$\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma) \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (4.2)$$

V dalších úvahách kvůli zjednodušení zápisů rovnic již nebudou uváděny funkční závislosti jednotlivých polí. Tučná písmena budou ale nadále značit vektory závislé na \mathbf{r} a ω . Stejně jako v minulé kapitole lze předpokládat, že řešení HD modelu všech polí (elektrické, magnetické, indukovaný proudové hustoty) uvnitř kovové částice bude součtem longitudinálního a transverzálního pole. Dalším předpokladem je podoba transverzálních a longitudinálních polí, kterou stanovíme zcela analogicky s předchozí kapitolou, konkrétně pro elektrické pole: $\mathbf{E}_T = \nabla \times \Psi_E$, $\mathbf{E}_L = \nabla \Phi_E$ a v případě proudu: $\mathbf{J}_T = \nabla \times \Psi_J$, $\mathbf{J}_L = \nabla \Phi_J$. Magnetické pole je možné spočítat z elektrického pole. Dosazením za $\mathbf{E} = \mathbf{E}_T + \mathbf{E}_L$ a $\mathbf{J} = \mathbf{J}_T + \mathbf{J}_L$ do (4.1) a (4.2) dostaneme (4.3) a (4.4).

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_T - k_0^2 \varepsilon_b (\mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T) = i\omega\mu_0 (\mathbf{J}_L + \mathbf{J}_T), \quad (4.3)$$

$$-\beta^2 \Delta \mathbf{J}_L + \omega_p (\omega + i\gamma) (\mathbf{J}_L + \mathbf{J}_T) = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 (\mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T). \quad (4.4)$$

Při úpravě rovnic (4.3) a (4.4) bylo využito relací $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_L = 0$ a také $\nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L = \Delta \mathbf{J}_L$, vycházejících z vlastností transverzálního a longitudinálního pole. Nyní je záhodno učinit další předpoklad, který velice usnadní další výpočty a je vesměs všude ve vědecké literatuře využíván bez toho, aniž by byl zmiňován, a to konkrétně ten, že transverzální a longitudinální pole spolu neinteragují. Případem, kdy by docházelo k nějaké vazbě mezi poli \mathbf{E}_T a \mathbf{E}_L bych se velice rád zabýval v další části vlastní dizertační práce. Prozatím však budeme počítat, že tomu tak není. Nyní tedy můžeme ze soustavy rovnic (4.3) a (4.4) vytvořit dvě soustavy rovnic: jednu pro \mathbf{E}_T a druhou pro \mathbf{E}_L . Z každé z těchto soustav je možné po jednoduchých úpravách získat rovnice pro námi definované funkce Ψ_E a Φ_E v podobě (4.5) a (4.6).

$$\nabla \times \nabla \times \Psi_E - k_0^2 \left(\varepsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \right) \Psi_E = 0, \quad (4.5)$$

$$\Delta \Phi_E - \frac{1}{\beta^2} \left(\omega(\omega + i\gamma) - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_b} \right) \Phi_E = 0. \quad (4.6)$$

První rovnice (4.5) je ve své podstatě vektorovou vlnovou rovnicí, pro kterou ve sférických souřadnicích existují řešení v podobě vektorových kulových vln $\mathbf{M}_{nme}^k, \mathbf{M}_{nmo}^k$,

$\mathbf{N}_{nme}^k, \mathbf{N}_{nme}^k$, přičemž jsme zde uvedli zjednodušený zápis. Všechny funkce jsou závislé na $\|\mathbf{r}\|$ a úhlech sférického souřadného systému θ, φ . Horní index k v našem značení označuje vlnové číslo, k hornímu indexu budeme v dalším popisu přidávat v případě rozptýleného pole index h , který bude znamenat, že radiální závislost v dané kulové funkci bude zajištěna Hankelovou funkcí prvního druhu (používáme časovou závislost $i\omega t$, pro závislost $-i\omega t$ by se musela použít Hankelova funkce druhého druhu). Pokud nebude v horním indexu h uvedeno, je tím automaticky myšleno, že radiální funkcí je Besselova funkce j_n (odpovídajícího řádu n). Dolní indexy n a m označují řády Legendrových polynomů a příslušných Besselových či Hankelových funkcí. Poslední koeficient e a o označuje, zda vlnová funkce, z níž byly vektorové kulové funkce vytvořeny, obsahovala sudou či lichou goniometrickou funkci vzhledem k změně φ na $-\varphi$. Celá problematika je však poměrně rozsáhlá a proto je vhodné čtenáře odkázat spíše na zdroje, kde mohou nalézt obsáhlý výklad [72, 73]. Nicméně krom zmíněných kulových vektorových funkcí je pro řešení HD modelu ještě nutná znalost gradientu $\nabla\Phi_E$, kde Φ_E je řešením (4.6) ve sférických souřadnicích. Poznamenejme dále, že je gradient též uvažován ve sférických souřadnicích. Konkrétní podobu $\nabla\Phi_E$ je nutné odvodit, zde můžeme uvést jejich konkrétní tvar (4.7) a (4.8), přičemž jednotlivé složky jsou uvedeny po řadě ve směrech r, θ a φ :

$$\nabla\Phi_{n,m,o}^{k_L} = \begin{pmatrix} k_L \sin(m\varphi) P_{n,m}(\cos\theta) \frac{d j_n(k_L r)}{d(k_L r)} \\ \sin(m\varphi) \frac{d}{d\theta} (P_{n,m}(\cos\theta)) r^{-1} j_n(k_L r) \\ \cos(m\varphi) \frac{m P_{n,m}(\cos\theta)}{\sin\theta} r^{-1} j_n(k_L r) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

$$\nabla\Phi_{n,m,e}^{k_L} = \begin{pmatrix} k_L \cos(m\varphi) P_{n,m}(\cos\theta) \frac{d j_n(k_L r)}{d(k_L r)} \\ \cos(m\varphi) \frac{d}{d\theta} (P_{n,m}(\cos\theta)) r^{-1} j_n(k_L r) \\ -\sin(m\varphi) \frac{m P_{n,m}(\cos\theta)}{\sin\theta} r^{-1} j_n(k_L r) \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Vrátíme-li se k rovnicím (4.5) a (4.6), pak je na první pohled zřejmý tvar jednotlivých vlnových čísel, a to ve tvaru (4.9). Z konkrétní znalosti funkcí Ψ_E a Φ_E lze dle výše uvedeného spočítat \mathbf{E}_T a \mathbf{E}_L . Následně dosazením longitudinálního a transverzálního pole do (4.3) a předpokladu, že longitudinální a transverzální spolu neinteragují, je možné dopočítat proudové hustoty \mathbf{J}_T a \mathbf{J}_L :

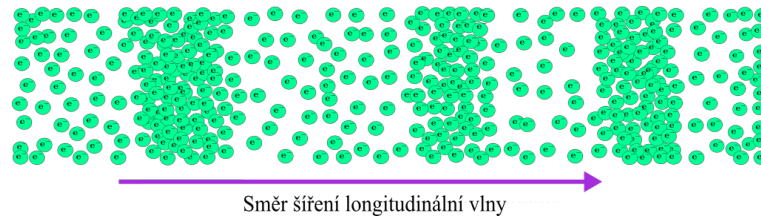
$$k_T^2 = k_0^2 \left(\varepsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \right), \quad k_L^2 = \frac{1}{\beta^2} \left(\omega(\omega + i\gamma) - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_b} \right). \quad (4.9)$$

Na tomto místě je však nutné ještě zmínit fakt, že pokud by v (4.1) nebyla zavedena veličina $\varepsilon_b(\omega) = \varepsilon_m(\omega) + \omega_p^2/\omega(\omega + i\gamma)$, pak by v (4.9) v případě transverzálního vlnového čísla nenastala rovnost $k_T^2 = k_0^2 \varepsilon_m(\omega)$. Právě předpis pro transverzální vlnové číslo má velmi zásadní vliv na další simulace, například pokud by v (4.9) byla namísto $\varepsilon_b(\omega)$ ponechána standardní relativní permitivita kovu $\varepsilon_m(\omega)$, pak by získané průběhy účinných průřezů extinkce, reflexe a absorpce v závislosti na frekvenci dopadající rovinné vlny byly zcela v rozporu s experimentálně naměřenými údaji těchto veličin. Tato nesrovnalost byla tedy vyřešena zavedením permitivity $\varepsilon_b(\omega)$ s vhodným funkčním předpisem do (4.1) s tím, že $\varepsilon_b(\omega)$ má význam permitivity iontového pozadí kovu. Teoreticky jistě existují i jiné cesty, jak zajistit správný tvar transverzálního vlnového čísla, například jistou modifikací rovnice (4.2) HD modelu, tímto problémem bych se v budoucnu dále rád zabýval.

4.2 Vlastnosti longitudinálního a transverzálního proudu

Nyní se lze na chvíli pozastavit nad hypotetickou interpretací významu longitudinální a transverzální proudové hustoty. Pro \mathbf{J}_T již z definice a názvu vyplývá, že tok proudové hustoty může probíhat pouze kolmo ke směru šíření takového proudového toku. Konkrétně si můžeme představit směr šíření v ose $\hat{\mathbf{z}}$, tok proudové hustoty ve směrech os $\hat{\mathbf{x}}$ a

\hat{y} . Na transversální proudovou hustotu můžeme tedy pohlížet analogicky jako v případě elektrického pole EM vlny například ve vakuu nebo dielektriku. Rozdíl fází mezi amplitudami složek proudu v osách \hat{x} a \hat{y} určí, jakým způsobem proudová hustota proudí či rotuje, například v kruhu, jako je tomu v případě vektoru elektrického pole pro kruhově polarizované světlo, atd. Pokud bychom se zabývali právě kulovým prouděním proudu, pak by měla být divergence toku kapaliny všude v jejím objemu nulová, čemuž odpovídá vztah $\nabla \cdot \mathbf{J}_T = \nabla \cdot \nabla \times \Psi_J = 0$. Obecně lze tak říci, že šíření transversální komponenty proudové hustoty přímo sleduje vlnění vektoru transversálního elektrického pole. Obrázek 4.3 zobrazuje směr toku longitudinální proudové hustoty. Ve směru šíření dochází ke stlačování a rozpínání media. Longitudinální proudová hustota \mathbf{J}_L vykazuje podobné vlastnosti jako zvuková vlna. Směr jejího toku je určen gradientem hustoty elektronového plynu, tedy směrem, ve kterém dochází k největší změně elektronové hustoty. Velice snadno lze ukázat, že skalární funkce Φ_E v rovnici (4.6) je funkcí hustoty elektronového plynu, a tudíž je proudová hustota $\mathbf{J}_L = \nabla \Phi_E$ orientována právě ve směru jejího gradientu, který je i směrem šíření toku proudové hustoty. Na rozdíl od \mathbf{J}_T dochází při toku proudové hustoty \mathbf{J}_L ke změnám hustoty elektronového plynu a směr šíření se shoduje se směrem jeho toku, naproti tomu u \mathbf{J}_T je směr šíření kolmý ke směru toku proudové hustoty.



Obrázek 4.3: Obrázek ilustrující směr šíření longitudinální proudové hustoty.

4.3 Implementace hydrodynamického modelu

V tuto chvíli jsou vyjasněny všechny zásadní informace potřebné pro hledání obecných řešení HD modelu ve sférických souřadnicích. Úlohu však můžeme dokončit až na základě nalezení takového řešení, které vyhovuje okrajovým podmínkám. Ty lze definovat stejně, jako je tomu v případě Mieho teorie, jen s tím rozdílem, že musí být stanovena podmínka pro indukovanou proudovou hustotu. Okrajové podmínky pro náš model byly zavedeny zcela stejně jako v [71] a mají podobu rovnic (4.10), (4.11) a (4.12). První dvojice rovnic (4.10) je standardní Maxwellovou okrajovou podmínkou spojitosti tečných složek elektrického pole na rozhraní sférické částice o poloměru a a to v tečném směru úhlu θ , φ . Druhá dvojice rovnic (4.11) opět vyjadřuje spojitost tečných složek, nyní ale pro magnetické pole. Na tomto místě by příslušelo rozvést menší diskuzi z toho důvodu, že obecně platné Maxwellovy okrajové podmínky pro ideální vodič vyjadřují nespojitost tečných složek magnetického pole o velikosti plošné proudové hustoty na hranici media [74]. Z pohledu Mieho teorie zavedení okrajové podmínky spojitosti tečných složek magnetického pole byla jediná možnost, neboť tato teorie neobsahovala žádný popis pro indukovanou proudovou hustotu. Osobně jsem se pokoušel i o zavedení standardní podmínky vyjadřující nespojitost tečných složek magnetického pole, avšak získané výsledky spektrálních průběhů extinkce a dalších účinných průřezů nevykazovaly typické rezonanční chování, a to jak v případě zlaté, tak stříbrné částice, a to ve velkém rozsahu zkoumaných průměrů. Zůstává tedy doposud velice důležitá otázka, jak velká nespojitost tečných složek magnetického pole skutečně existuje, a do jaké míry je správné použít okrajovou podmínku spojitosti typickou pro dielektrické materiály. Poslední okrajovou podmínkou je vztah (4.12), vyjadřující představu, že radiální složka indukovaného proudové hustoty je na povrchu částice nulová, a tedy že se elektrony mohou pohybovat pouze v objemu částice a

nemohou se dostat mimo ni.

$$\mathbf{E}_\theta^{inc}(a) + \mathbf{E}_\theta^s(a) = \mathbf{E}_\theta^p(a), \quad \mathbf{E}_\varphi^{inc}(a) + \mathbf{E}_\varphi^s(a) = \mathbf{E}_\varphi^p(a), \quad (4.10)$$

$$\mathbf{H}_\theta^{inc}(a) + \mathbf{H}_\theta^s(a) = \mathbf{H}_\theta^p(a), \quad \mathbf{H}_\varphi^{inc}(a) + \mathbf{H}_\varphi^s(a) = \mathbf{H}_\varphi^p(a), \quad (4.11)$$

$$\mathbf{J}_r(a) = 0. \quad (4.12)$$

Posledním krokem, jenž dále umožní nalézt vzorce pro jednotlivé koeficienty rozkladu polí uvnitř a vně částice, je zavedení vztahů mezi poli a rozkladovými funkcemi. První dvě rovnosti (4.14) a (4.15) představují rozklady dopadajícího elektrického a magnetického pole jen pro řád daný čísly n a m . K získání celkového dopadajícího elektrického pole je zapotřebí ještě provést sumaci: $\mathbf{E}^{inc} = \sum_m \sum_{n=1}^{\infty} i^n 2n / (n(n+1)) \mathbf{E}_{nm}^{inc}$, přičemž sumace přes m díky symetrii probíhá jen přes čísla -1 a 1 . Stejným způsobem jsou chápány všechny ostatní níže uvedené rovnosti (4.16) až (4.19). Poznamenejme, že k získání celkových polí je zapotřebí sumaci provádět s váhovým faktorem $i^n 2n / (n(n+1))$ příslušným k danému řádu sférických funkcí. Při odvození vztahů pro magnetická pole bylo užito relace $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{E}$ a vlastností kulových funkcí $\nabla \times \mathbf{M}_{nme,o}^k = k \mathbf{N}_{nme,o}^k$. Rovnice (4.19) vychází z (4.1) a funkce F , S mají předpisy: $S = i\varepsilon_0 \varepsilon_b$, $F = S - \frac{ik_T^2}{\mu_0 \omega}$. Vztahy (4.14) až (4.19) po dosazení do okrajových podmínek (4.10) až (4.12) představují dvě soustavy pěti rovnic o pěti neznámých. Rovnice se sestavují tak, aby vždy v jedné rovnici byly pohromadě pouze výrazy se stejnými funkčními závislostmi na obou úhlech θ a φ .

$$\mathbf{E}_{nm}^{inc} = \mathbf{M}_{nmo}^{k_0} - i \mathbf{N}_{nme}^{k_0}, \quad (4.13)$$

$$\mathbf{H}_{nm}^{inc} = -\frac{k_0}{\omega c} \left(\mathbf{M}_{nme}^{k_0} + i \mathbf{N}_{nmo}^{k_0} \right), \quad (4.14)$$

$$\mathbf{E}_{n,m}^p = B_e \mathbf{M}_{nme}^{k_T} + B_o \mathbf{M}_{nmo}^{k_T} - i A_e \mathbf{N}_{nme}^{k_T} - i A_o \mathbf{N}_{nmo}^{k_T} + C_e \nabla \Phi_{nme}^{k_L} + C_o \nabla \Phi_{nmo}^{k_L}, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{H}_{nm}^p = \frac{k_T}{\omega c} \left(A_e \mathbf{M}_{nme}^{k_T} + A_o \mathbf{M}_{nmo}^{k_T} + i B_e \mathbf{N}_{nme}^{k_T} + i B_o \mathbf{N}_{nmo}^{k_T} \right), \quad (4.16)$$

$$\mathbf{E}_{nm}^s = -\beta_e \mathbf{M}_{nme}^{h,k_0} - \beta_o \mathbf{M}_{nmo}^{h,k_0} + i \alpha_e \mathbf{N}_{nme}^{h,k_0} + i \alpha_o \mathbf{N}_{nmo}^{h,k_0}, \quad (4.17)$$

$$\mathbf{H}_{nm}^s = -\frac{k_0}{\omega c} \left(i \beta_e \mathbf{M}_{nme}^{h,k_0} + i \beta_o \mathbf{M}_{nmo}^{h,k_0} + i \alpha_e \mathbf{N}_{nme}^{h,k_0} + i \alpha_o \mathbf{N}_{nmo}^{h,k_0} \right), \quad (4.18)$$

$$\mathbf{J}_{nm} = -F \left(i A_e \mathbf{N}_{nme}^{k_T} + i A_o \mathbf{N}_{nmo}^{k_T} + i B_e \mathbf{M}_{nme}^{k_T} + i B_o \mathbf{M}_{nmo}^{k_T} \right) + \quad (4.19)$$

$$+ S \left(C_e \nabla \Phi_{nme}^{k_L} + C_o \nabla \Phi_{nmo}^{k_L} \right).$$

Řešení výše definované úlohy interakce sférické částice s dopadající rovinnou vlnou je poměrně zdlouhavé a pracné, proto ho zde nebudeme detailně uvádět. Lze však konstatovat, že pouze pět hledaných koeficientů rozkladu zůstane nenulových a to konkrétně: A_e , α_e , B_o , C_e , β_o . Připomeňme, že koeficienty α_e a β_o jsou koeficienty rozkladu rozptýleného pole ve vnějším prostředí částice, ostatní koeficienty se týkají rozkladu vnitřního pole uvnitř částice. Zde nebudeme uvádět konkrétní finální tvary těchto koeficientů, ale pouze budou zmíněny některé výsledky vybraných veličin v porovnání s dalšími výpočty vycházejícími z možných modifikací HD, které budou rozebrány v dalších podkapitolách.

4.4 Hydrodynamický model s radiačním útlumem

V této části budou ukázány dvě možné modifikace HD modelu. Z části bude využit postup uvedený v [71], který zajistí požadovanou hodnotu transversálního vlnového čísla: $k_t^2 = k_0^2 \varepsilon_m$. Úvaha o modifikaci HD modelu vznikla na základě známého faktu, že všechny elektricky nabitě částice při zrychleném pohybu vyzařují elektromagnetické pole, což v rámci našeho popisu můžeme brát jako formu útlumu. V klasickém HD modelu je útlum

zaveden standardním způsobem, jako by se dal pohyb elektronového plynu připodobnit nějakému problému z klasické mechaniky (například závaží na pružině). O procesech brzdného záření nabitých částic lze čerpat informace například z [75, 76]. Celá problematika spjatá s tímto jevem je poměrně rozsáhlá, zde ji však není potřeba rozebírat. Postačí nám pouze akceptovat, že jevy svázané s nerovnoměrným pohybem elektronu jsou komplikované a dají se ve frekvenční doméně v pohybové rovnici elektronového plynu nahradit nějakou nám neznámou funkcí $U(\omega)$. Nyní lze uvažovat modifikovaný HD model v podobě rovnic (4.20) a (4.21):

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) \mathbf{E} = i\omega\mu_0 \mathbf{J}, \quad (4.20)$$

$$\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J} + U(\omega) \mathbf{J} = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}. \quad (4.21)$$

Podobně jako v předchozí části, kde bylo zdůvodněno zavedení permitivity iontového pozadí daného kovu, tak i v našem případě je zapotřebí učinit podobný krok, aby bylo následně možné docílit požadované hodnoty pro vlnové číslo k_m . Z tohoto důvodu je v (4.20) zaveden výraz $(\varepsilon_m - \varepsilon_{eg})$, kde ε_t označuje celkovou permitivitu kovu a ε_{eg} je permitivita samotného volného elektronového plynu a my ji v dalších úvahách budeme považovat spolu s $U(\omega)$ za neznámou proměnnou. Rovnice nového modelu jsou téměř shodné s rovnicemi klasického HD modelu, proto můžeme využít vztahy pro vlnová čísla (4.9) a nahradit ε_b za $(\varepsilon_t - \varepsilon_{eg})$ a místo ω ($\omega + i\gamma$) použít $U(\omega)$, tím dostaneme

$$k_T^2 = k_0^2 \left(\varepsilon_m - \varepsilon_{eg} - \frac{\omega_p^2}{U(\omega)} \right), \quad k_L^2 = \frac{1}{\beta^2} \left(U(\omega) - \frac{\omega_p^2}{(\varepsilon_t - \varepsilon_{eg})} \right). \quad (4.22)$$

Nyní můžeme na nové vztahy (4.22) nahlížet jako na dvě rovnice o dvou neznámých ε_{eg} a $U(\omega)$. Na tomto místě se nabízejí dvě možnosti určení neznámých veličin $U(\omega)$ a $\varepsilon_{eg}(\omega)$. První z nich je vybudování nové teorie opírající se o hlubší kvantově mechanické úvahy v oblasti pevných látek, především kovů, což by bylo nepochybně velice obtížné. Druhá možnost je naopak velmi snadná a to aplikovat v předchozí podkapitole využitý trik, tedy definovat přímo, že mají být vztahy (4.22) rovny vlnovým číslům $k_T^2 = k_0^2 \varepsilon_t$ a $k_L^2 = \eta/\beta^2$, kde $\eta = \omega(\omega + i\gamma) - \omega_p^2/(\varepsilon_m + \omega_p^2/\omega(\omega + i\gamma))$. Takto získáme následující dvě rovnice pro neznámé $\varepsilon_{eg}(\omega)$ a $U(\omega)$:

$$\varepsilon_m - \varepsilon_{eg} - \frac{\omega_p^2}{U(\omega)} = \varepsilon_m, \quad U(\omega) - \frac{\omega_p^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_{eg})} = \eta. \quad (4.23)$$

Z rovnic (4.23) lze velice jednoduše odvodit kvadratickou rovnici pro neznámou $U(\omega)$, přičemž budou uvažována jen ta řešení, která nebudou odporovat výpočtům z předešlého standardního HD modelu:

$$U(\omega)^2 - \eta U - \eta \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_m} = 0. \quad (4.24)$$

Posledním krokem, který může být učiněn, je využití definice radiačního útlumu tak, že porovnáme nově získaný výraz pro $U(\omega)$ s výrazem $\omega(\omega + i\gamma)$ ze standardního HD modelu, odchylku mezi těmito výrazy můžeme považovat za námi definovaný útlum. Vyjdeme-li z předpokladu, že radiační útlum bude souviset se zrychlením elektronové hustoty dané druhou časovou derivací, pak Fourierovou transformací získáme: $\gamma_r \frac{d^2}{dt^2} \xrightarrow{f} -\gamma_r \omega^2$. Symbolem γ_r je myšlen útlumový parametr, který je však funkcí ω , poněvadž jsou v něm zahrnuty všechny možné mezielektronové interakce a další jevy kvantové povahy vytvářející námi definovaný útlum.

$$U(\omega) = -\gamma_r \omega^2 + \omega(\omega + i\gamma) \implies \gamma_r = \frac{(\omega + i\gamma)}{\omega} - \frac{U(\omega)}{\omega^2}. \quad (4.25)$$

Další možnou variantou jak modifikovat HD model je zavedení útlumu vycházejícího z fyziky kapalin a hypotetické představy elektronového plynu jako elektrickým nábojem nabitě kapaliny, tomu je věnována následující podkapitola.

4.5 Hydrodynamický model s radiačním a viskózním útlumem

V předchozí podkapitole bylo zmíněno, že útlum v pohybové rovnici indukovaného proudu je ve standardním HD modelu zaveden tak, jako by bylo snahou analyzovat nějaký mechanický proces. To je však pochopitelné z mnoha důvodů. Lze se domnívat, že podstata všech jevů stojících za útlumem může být natolik komplikovaná, že je jednoduše účinnější všechny tyto jevy zahrnout do parametru označeného útlumová konstanta. Na druhou stranu je pak zcela relevantní otázka, proč nezanechat v HD modelu viskózní útlum, když odvození HD modelu z velké části vychází z mechaniky kapalin ze Stokes-Navierovy rovnice. O viskózním útlumu hustého plazmatu, jehož popis je založen na HD modelu a na DDFT (Dynamic Density Functional Theory), tedy teorie funkcionálu dynamické hustoty, se lze dočíst například v [77]. Postup níže uvedené modifikace HD modelu bude prakticky shodný s kroky použitými v předchozí podkapitole o HD modelu s radiačním útlumem. Jednak bude předpokládána obecná $U(\omega)$, jednak bude do pohybové rovnice pro indukovaný proud dodán člen s Laplaceovým operátorem a koeficientem viskózního útlumu $\gamma_v \Delta$, podobně jak je tomu v rovnicích proudění kapalin [78]. Takto získáme následující rovnice:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) \mathbf{E} = i\omega\mu_0 \mathbf{J}, \quad (4.26)$$

$$\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J} + \gamma_v \Delta \mathbf{J} + U(\omega) \mathbf{J} = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}. \quad (4.27)$$

Soustavu rovnic (4.26) a (4.27) je možné řešit postupem, který zde byl několikrát podrobně rozebrán (např. v podkapitole 1.2.4). Z rovnice (4.26) je možné vyjádřit indukovaný proud pomocí elektrického pole a tento výraz, po dosazení do druhé rovnice (4.27), dá rovnici pouze pro elektrické pole. Tato rovnice je současně rovnicí pro longitudinální i transverzální pole, které se však řeší odděleně. Tím se získají vztahy pro vlnová čísla transverzálního (4.28) a longitudinálního pole (4.29):

$$k_T^4 - \left(\gamma_v^{-1} U(\omega) + k_0^2 (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) \right) k_T^2 + k_0^2 \gamma_v^{-1} \left(U(\omega) (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) - \omega_p^2 \right) = 0, \quad (4.28)$$

$$k_L^2 = \frac{1}{\beta^2 + \gamma_v} \left(U(\omega) - \frac{\omega_p^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_{eg})} \right). \quad (4.29)$$

Dalším krokem je vyřešení rovnic (4.28), (4.29), a to na základě identických podmínek z předešlé subkapitoly tedy: $k_T^2 = k_0^2 \varepsilon_m$ a $k_L^2 = \eta / \beta^2$, přičemž předpis funkce η je stejný jako v případě předchozí modifikace HD modelu s radiačním útlumem. Zřejmě nejjednodušší způsob, jak vyřešit podmínku (4.28) je položit první závorku rovno nule a druhou rovno výrazu $k_0^2 \gamma_v \varepsilon_m^2$. Jinou možností je naopak položení první závorky rovno výrazu $k_0^2 \varepsilon_m^2 = k_T^2$ a druhé rovno nule. To by ale znamenalo, že by longitudinální vlnové číslo mělo nulovou hodnotu a tudíž by se vlastně jednalo o model lokální odezvy. Zde bude proto dále analyzována první varianta, definovaná rovnicemi (4.30) a (4.31):

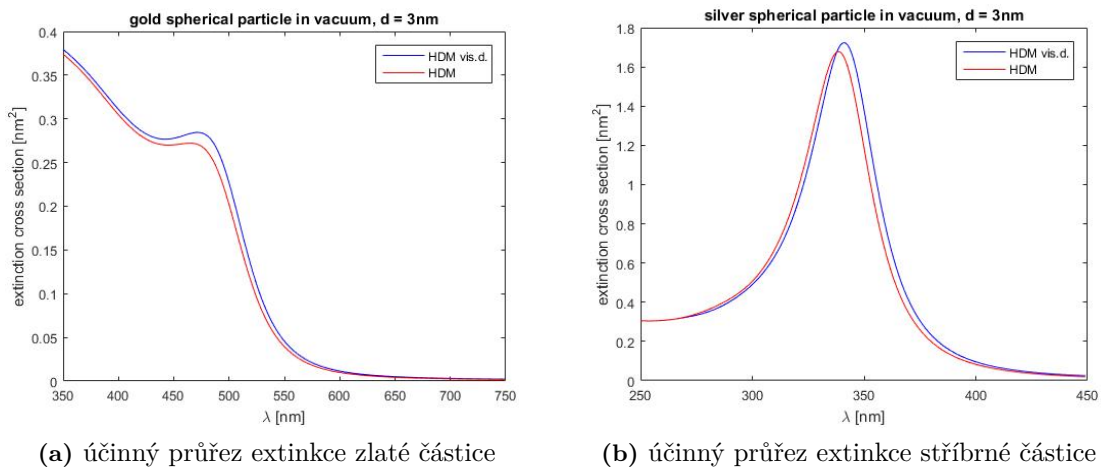
$$\gamma_v^{-1} U(\omega) + k_0^2 (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) = 0, \quad U(\omega) (\varepsilon_m - \varepsilon_{eg}) - \omega_p^2 = k_0^2 \gamma_v \varepsilon_m^2, \quad (4.30)$$

$$\frac{1}{\beta^2 + \gamma_v} \left(U(\omega) - \frac{\omega_p^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_{eg})} \right) = \frac{\eta}{\beta^2}. \quad (4.31)$$

Pro účely této disertační práce z hlediska přehlednosti a srozumitelnosti má nepochybně větší význam doložit zde uvažované modely konkrétními výpočty jednotlivých veličin, než-li zde vypisovat komplikované vzorce. Stručný výčet vybraných výsledků je uveden v následující subkapitole.

4.6 Vybrané simulace dle HD modelu a jeho navržených modifikací

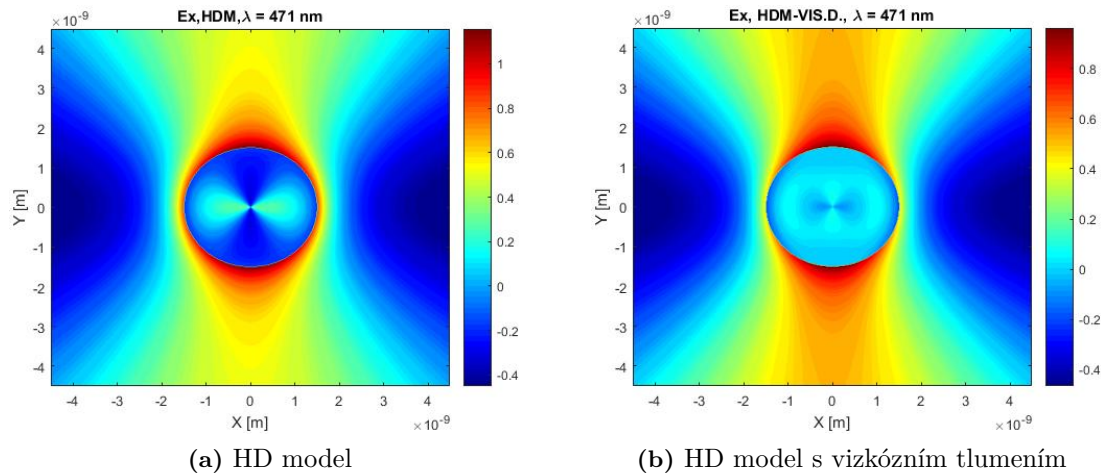
V této části jsou porovnány vybrané simulace interakce dopadající rovinné vlny se zlatou a stříbrnou sférickou částicí tak, jak to znázorňuje obrázek 4.1. Jednotlivé parametry standardního HD modelu, které jsou obsaženy i v modifikovaných verzích ve výše zavedené funkci η a konstantě β , lze dohledat například v [57]. Konkrétní hodnoty parametrů jsou pro zlato: $\hbar\gamma = 0.071eV$, $\hbar\omega_p = 9.02eV$ a pro stříbro: $\hbar\gamma = 0.025eV$, $\hbar\omega_p = 8.99eV$, Fermiho rychlost má pro oba kovy velikost: $v_f = 1.39 \cdot 10^6 m \cdot s^{-1}$ a konstanta β je v obou případech definována stejným způsobem: $\beta^2 = 3/5v_f^2$. Před tím, než zde budou diskutovány vybrané výsledky některých simulací, je třeba si uvědomit, že výpočty vzešlé ze standardního HD modelu a z HD modelu s radiačním útlumem jsou totožné. Tento fakt je důsledkem požadavku, aby HD model a jeho modifikace HD modelu s radiačním útlumem měly stejná vlnová čísla, z čehož plyne i stejný funkční předpis pro funkce $F(\omega)$ a $S(\omega)$ v (4.19), neboť mají oba HD modely stejnou podobu diferenciálních rovnic. Níže budou tedy rozebírány simulace získané jen ze standardního HD modelu a z HD modelu s viskózním a radiačním útlumem. Pro průměr sférické částice byla zvolena hodnota 3 nm, a to z toho důvodu, že při tomto rozměru je rozdíl ve výsledcích patrný. Pokud by byla zvolena menší hodnota průměru, byly by rozdíly zřetelnější, ale taktéž by měly zesilovat kvantové jevy jako „spill out“ efekt či Landaův útlum, které nebyly v zde prezentovaných modelech zahrnuty.



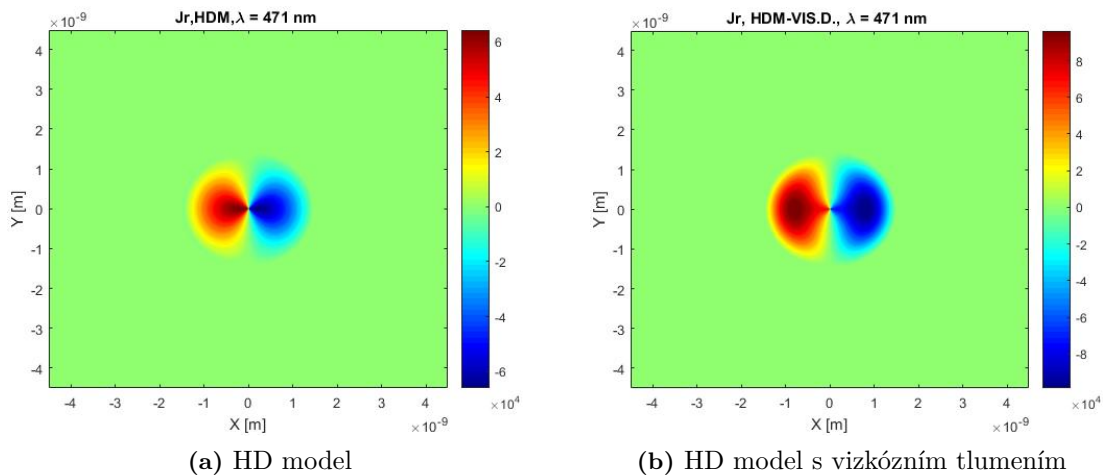
Obrázek 4.4: Účinný průřez extinkce zlaté (a) a stříbrné (b) sférické částice o průměru 3 nm ve vakuu při interakci s dopadající rovinnou vlnou.

Z obrázku 4.4 je patrné, že pro obě částice HD model s viskózním útlumem předpovídá korekci modrého posuvu hlavního rezonančního maxima extinkce a jeho o něco vyšší hodnoty. Poloha tohoto rezonančního maxima vypočítaná pomocí HD modelu je 471 nm pro zlatou částici ve vakuu a 338 nm pro stříbrnou částici ve vakuu. V případě HD modelu s viskózním útlumem mají vlnové délky rezonančního maxima hodnotu 475.5 nm pro zlatou částici a 341.4 nm pro stříbrnou částici. V obou případech se tak jedná o korekci modrého posuvu v hodnotě 3 až 4 nm. Přesto je modrý posuv stále výrazný, neboť se mají dle Mieho teorie rezonanční maxima nacházet na vlnových délkách 506 nm a 352.5 nm v případě zlaté, respektive stříbrné částice. Níže jsou na následujících dvou obrázcích 4.5 a 4.6 porovnány výpočty x-ové složky elektrického pole a radiální složky indukovaného proudu podle HD modelu a jeho navržené modifikace zahrnující viskózní útlum elektronového plynu. Výpočty zvolených veličin byly v obou případech počítány

pro rezonanční vlnovou délku 471 nm určenou standardním HD modelem z toho důvodu, že v okolí rezonance lze očekávat největší rozdíly mezi zde srovnávanými modely. Rovina řezu, již je definována výpočetní oblast, byla zvolena kolmo na osu \hat{z} (viz. obrázek 4.1), neboť lze usuzovat, že indukovaný proud bude sledovat především vektor elektrického pole dopadající rovinné vlny, který je orientován ve směru osy \hat{x} .



Obrázek 4.5: Rozložení x-ové složky elektrického pole zlaté sférické částice o průměru 3 nm při interakci s dopadající rovinnou vlnou o vlnové délce 471 nm ve vakuu podle (a) HD modelu a (b) HD modelu s viskózním útlumem.

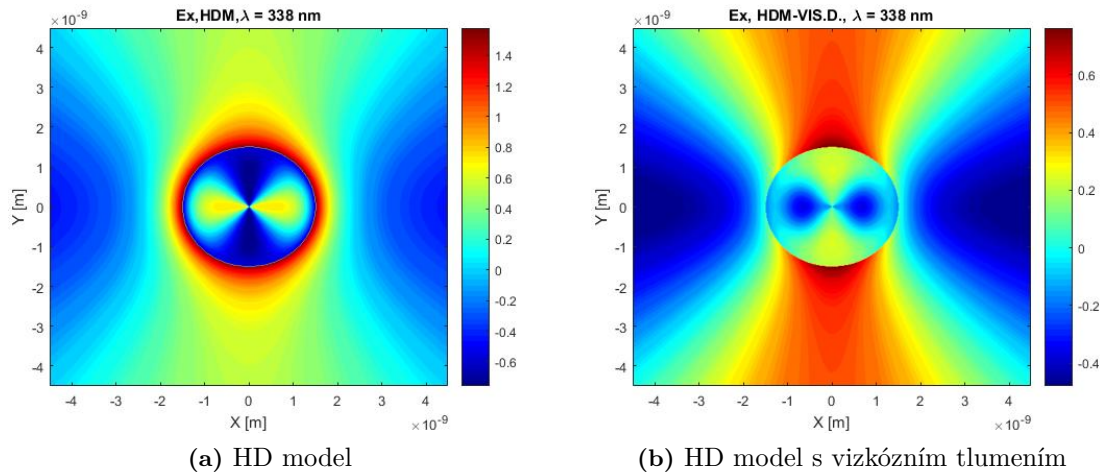


Obrázek 4.6: Rozložení radiální složky indukované proudové hustoty uvnitř zlaté sférické částice o průměru 3 nm při interakci s dopadající rovinnou vlnou o vlnové délce 471 nm ve vakuu podle (a) HD modelu a (b) HD modelu s viskózním útlumem.

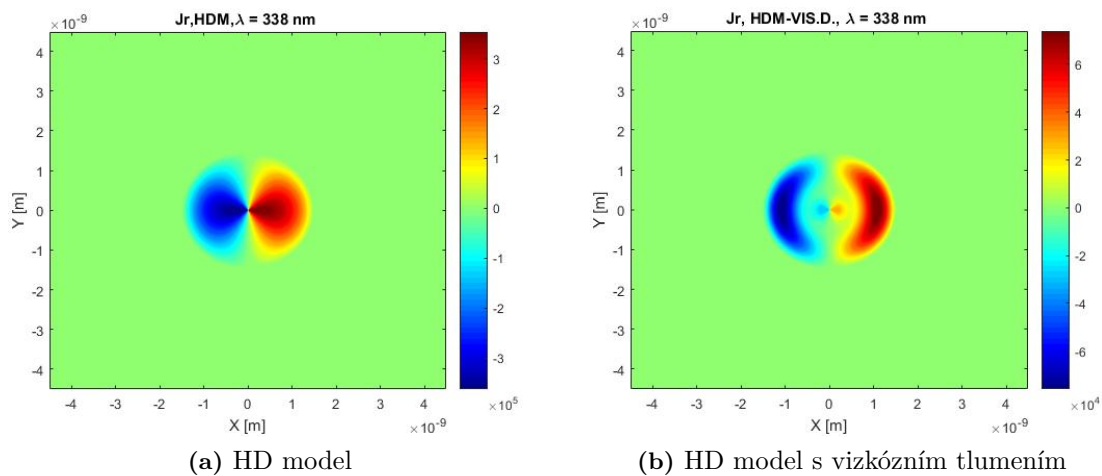
Z obrázku 4.5 je patrné, že jednak HD model s viskózním útlumem předpokládá o něco menší kladné hodnoty elektrického pole, znázorněné červenou barvou, ale hlavně menší intenzitu elektrického pole uvnitř částice. Po zlatu je v oboru plazmoniky velmi často užívaným a diskutovaným kovem stříbro, níže jsou proto ukázány některé výpočty právě pro sférickou stříbrnou částici. Z důvodu snadnějšího porovnání HD modelů a samotného chování stříbrné částice v interakci s dopadající rovinnou vlnou byly zvoleny zcela stejné parametry výpočtů jako výše v případě zlaté částice, pouze se liší rezonanční vlnová délka, která byla pomocí standardního HD modelu určena na 338 nm.

Jak je vidět z obrázku 4.7, HD model s viskózním útlumem opět i v případě stříbrné čás-

tice předpokládá oproti klasickému HD modelu slabší elektrické pole, nyní je však tento rozdíl výraznější. Lze si též všimnout výrazně silnější až dvojnásobné intenzity indukovaného proudu. Ze zmíněných vlastností vyplývá i jistá souvislost mezi mírou intenzity indukovaného proudu a oslabením elektrického pole uvnitř částice.

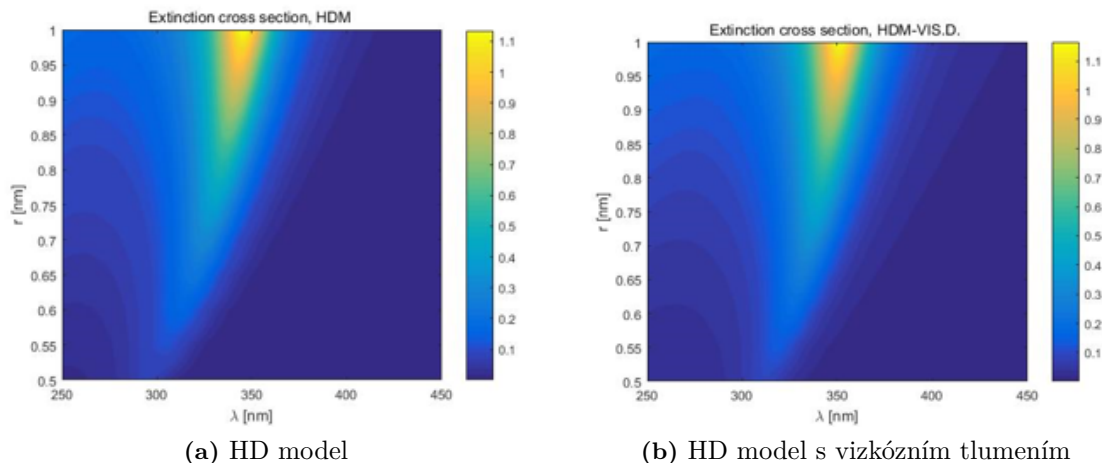


Obrázek 4.7: Rozložení x-ové složky elektrického pole stříbrné sférické částice o průměru 3 nm při interakci s dopadající rovinnou vlnou o vlnové délce 338 nm ve vakuu podle (a) HD modelu a (b) HD modelu s viskózním útlumem.



Obrázek 4.8: Rozložení radiální složky indukované proudové hustoty uvnitř stříbrné sférické částice o průměru 3 nm při interakci s dopadající rovinnou vlnou o vlnové délce 338 nm ve vakuu podle (a) HD modelu a (b) HD modelu s viskózním útlumem.

Vzhledem k tomu, že se často příprava nanočástic provádí ve vodných roztocích, tak je z tohoto hlediska zajímavé zkoumat vlastnosti kovových částic ve vodě. Níže na obrázku 4.9 je uvedeno srovnání vývoje účinného průřezu extinkce stříbrné částice v prostředí vody podle HD modelu a jeho modifikace s viskózním útlumem. Aby byly rozdíly co nejvýraznější, byly výpočty prováděny pro rozmezí poloměru částice od 0.5 do 1 nm, samozřejmě musí být tyto výsledky brány s jistou rezervou, neboť se u takto malé částice mohou projevovat zatím neuvažované efekty. Jedním z nich je bezesporu jev kvantového tunelování elektronu za námi definovanou hranici částice. Z obr. 4.9 je patrný rudý posuv rezonanční vlnové délky u HD modelu s viskózním tlumením oproti standardnímu HD modelu, přičemž se maximální hodnota extinkce výrazně mezi modely neliší.



Obrázek 4.9: Vývoj účinného průřezu extinkce v závislosti na poloměru stříbrné částice ve vodě a vlnové délce dopadající vlny (a) HD modelu a (b) HD modelu s viskózním útlumem.

Na zde ukázaných postupech výpočtů užitých při výpočtech polí a dalších charakteristik interakce sférické kovové částice s rovinnou vlnou lze dále stavět při analýze zajímavých struktur a kompozitů z těchto částic vytvořených. Například je možné studovat vlastnosti fotonických krystalů skládajících se z periodicky uspořádaných sférických částic v dielektrickém materiálu. Nalezení analytického adekvátního popisu složitých struktur je samozřejmě komplikovanou záležitostí, vyžadující celou řadu aproximací. Z tohoto důvodu je dobré zmapovat nejjednodušší případ a to dimer dvou sférických kovových částic. Úlohou interakce dimeru s rovinnou vlnou jsem se v minulosti zabýval, ale nepodařilo se mi úlohu úspěšně dokončit, rád bych se však k této problematice vrátil. Na struktuře dimeru by bylo možné analyzovat celou řadu efektů, jako je zvýšená intenzita elektrického pole (hot spot) mezi částicemi, či již zmíněný jev tunelování elektronu. Toto tunelování se začne projevovat, pokud vzdálenost mezi částicemi klesne pod 1 nm, čímž vznikne hypotetické propojení kovových částic umožňující tok proudu z jedné částice na druhou [15, 16].

Zjevně nejjednodušší možnou geometrií, na které by bylo možné dále ověřovat a analyzovat vlastnosti nelokální interakce dle standardní verze HD modelu a uvažovaných modifikací, je nekonečná rovinná kovová vrstva. V navazující kapitole je uveden HD model pro tuto geometrii, na několika simulacích je provedeno srovnání HD modelu s klasickým lokálním přístupem.

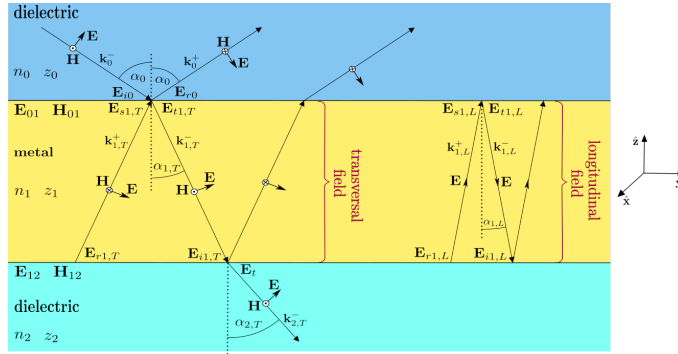
Nelokální model kovové vrstvy a dvojvrstvy

Tato kapitola je zaměřena na analýzu nelokálních vlastností tenkých kovových vrstev, a to především proto, že se jedná o struktury s nejmenší náročností na výpočetní analýzu, ale také z hlediska proveditelnosti výroby. Jedná se tedy také o vhodnou strukturu pro ověření správnosti současných modelů. Ve srovnání s výpočty založenými na klasické teorii je řešení interakce popsané HD modelem i pro tyto elementární struktury mnohem obtížnějším problémem. Značná pozornost je stále věnována metalo-dielektrickým vrstvám, neboť lze předpokládat, že mohou mít jedinečné vlastnosti ve specifických konfiguracích a spektrálních rozsazích. Jako příklad můžeme uvést hyperbolické metamateriály [79, 80], které mohou teoreticky transformovat evanescentní vlny na šířící se a umožnit tak zobrazování pod vlnovou délkou nebo umožňují použití vysoce citlivých senzorů [81]. Další teoreticky možnou realizací, které lze dosáhnout pomocí vrstev kov-dielektrikum, je prostředí se záporným indexem lomu [82, 83]. Samotnou kapitolou je vývoj citlivých senzorů využívajících specifických vlastností povrchových plazmonů [18, 84–86]. Návrh konstrukcí a jejich správné fungování v uvedených aplikacích vždy závisí na co nejpřesnějších výpočtech. Tomu odpovídá i velké úsilí zaměřené na vývoj simulačních modelů. V poslední době bylo vyvinuto mnoho nelokálních analytických nebo numerických modelů pro analýzu metalo-dielektrických vrstev, přičemž každý z nich má svou vlastní využitelnost nebo omezení. Nejzákladnější model je založen na modifikovaných Fresnelových vztazích, tj. nelokálních součinitelích odrazu a přenosu na rozhraní dvou materiálových poloprostorů [87, 88]. Modifikované Fresnelovy koeficienty jsou ve skutečnosti také základem mnoha složitějších modelů. Příkladem je model analyzující vlastnosti povrchového plazmonu na nelokálním metamateriálu [87]. Při určitých omezeních tloušťky kovové vrstvy lze zkoumat i nelokální vlastnosti dielektricko-kovových vrstev [89]. Modifikované Fresnelovy koeficienty jsou také důležitou součástí povrchového HDM [90]; tento model zohledňuje tzv. spill-out jev, tj. skutečnost, že nenulová elektronová hustota může proudit mimo kovové rozhraní [26–28, 31, 91]. Publikovány byly i některé další nelokální modely kovových vrstev, zaměřené především na analýzu vlnovodných vlastností těchto vrstev a šíření povrchového plazmonu [92, 93]. Současně se vyvíjejí nelokální numerické metody založené na přísném formalismu rozptylových matic [94].

Struktura s interakčním modelem je zobrazena na obrázku 5.1. Rovina dopadu transversální magnetické (TM) polarizované rovinné vlny je určena osami \hat{z} a \hat{y} . První vrstva shora je dielektrikum definované indexem lomu n_0 a impedancí $z_0 = \sqrt{\mu/\varepsilon}$, kde μ a ε označují relativní permeabilitu a permitivitu prvního média. Impedance vakua defino-

vaná vakuovými hodnotami permitivity a permeability je označována symbolem η_0 , kde $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$. Další vrstva znázorněná žlutou barvou je kov s komplexním indexem lomu n_1 a impedancí $z_1 = \sqrt{\mu_1/\varepsilon_1}$. Poslední vrstva je opět dielektrikum s parametry n_2 , z_2 . Normy vlnových vektorů dopadající vlny $|\mathbf{k}_0^+|$ a odražené vlny $|\mathbf{k}_0^-|$ budou označovány jako k_0 . Dále využijme standardní značení, to jest k veličinám transverzálních polí přiřadíme dolní index T a veličinám longitudinálních polí dolní index L . Dopadající vlna v prvním prostředí svírá s osou $\hat{\mathbf{z}}$ úhel α_0 a transmitovaná vlna do druhého prostředí, tedy kovové vrstvy úhel $\alpha_{1,T}$.

Pro geometrii rovinné vrstvy, která je zde uvažována, a za předpokladu ustáleného stavu lze řešení Maxwellových rovnic uvažovat ve formě harmonického prostorově-časového vývoje. Předpokládejme, že můžeme definovat jak transverzální, tak longitudinální elektrické pole následovně: $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) \equiv \mathbf{E}_T e^{i(\mathbf{k}_T \mathbf{r} - \omega t)}$, $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) \equiv \mathbf{E}_L e^{i(\mathbf{k}_L \mathbf{r} - \omega t)}$. Amplitudy polí jsou klíčovými veličinami pro naše další úvahy, zavedme pro ně následující značení: $|\mathbf{E}_T| \equiv E_T$, $|\mathbf{E}_L| \equiv E_L$. Z Maxwellových rovnic lze snadno odvodit vztah mezi amplitudami magnetických a elektrických polí rovinné vlny, ty můžeme obecně s ohledem na index a dané vrstvy ($a = 0, 1, 2$) uvést v následující podobě: $z_a^{-1} \mathbf{E}_a = \eta_0 \mathbf{H}_a$. Tyto rovnice spolu tvoří základy



Obrázek 5.1: Schéma nelokální interakce dopadající TM rovinné vlny s kovovou vrstvou.

našeho modelu. Všechny relevantní následující vztahy mohou být odvozeny z geometrických vztahů mezi elektrickými a magnetickými vektory vln zobrazených na obrázku 5.1. Nicméně otázka, jak určit jednotlivé úhly lomu $\alpha_{1,T}$ a $\alpha_{1,L}$, zatím nebyla vyřešena. Odpověď je velmi jednoduchá, protože elektrická a magnetická pole mají stejnou frekvenci, stačí se zabývat, nezávisle na čase, pouze fázovým průběhem polí na rozhraní. Jinými slovy, projekce vlnových vektorů do osy $\hat{\mathbf{y}}$ musí být pro všechna pole jak transverzální tak longitudinální stejná, což je vlastně obecnější „nelokální“ formulace Snellova zákona lomu, který lze napsat následujícím způsobem:

$$\sin \alpha_{1,T} = \frac{k_0}{k_T} \sin \alpha_0, \quad \sin \alpha_{1,L} = \frac{k_0}{k_L} \sin \alpha_0. \quad (5.1)$$

Hodnoty $\cos \alpha_{1,T}$ a $\cos \alpha_{1,L}$ mohou být přímo určeny z goniometrických vztahů a ze znalosti hodnoty $\sin \alpha_{1,T}$ a $\sin \alpha_{1,L}$, resp. vzorce mohou být dále upraveny, pokud definujeme: $k_T = (\omega/c)n_1$, $k_L = (\omega/c)n_1, L$. Tím získáváme vztahy (5.2) a (5.3):

$$\cos \alpha_{1,T} = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha_{1,T}} = \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2 \sin^2 \alpha_0}, \quad (5.2)$$

$$\cos \alpha_{1,L} = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha_{1,L}} = \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_{1,L}}\right)^2 \sin^2 \alpha_0}. \quad (5.3)$$

Pokud by nás zajímala pouze bezetrátová dielektrická vrstva s indexem lomu n_1 místo kovové, pak pro totální odraz, pro nějž platí $(n_0/n_1) \sin \alpha_0 > 1$, bude $\cos \alpha_{1,T}$ imaginární

a do dielektrické vrstvy se dostane pouze evanescentní vlna. V případě kovové vrstvy má $\cos \alpha_{1,T}$ vždy komplexní hodnotu.

Jak bude patrné, hodnoty tečných složek elektrických a magnetických polí k rozhraní kovové vrstvy lze určit pouze z geometrických úvah. Jak již bylo zmíněno, ze spojitosti tečných složek polí na rozhraní jednotlivých vrstev vyplývá, že všechna pole musí mít podél rozhraní stejný harmonický průběh. Díky tomu se nemusíme zabývat touto závislostí a bude nám stačit uvažovat pouze fázové změny mezi celkovým transmitovaným a odraženým polem mezi prvním a druhým rozhraním. Transverzální vlna $\mathbf{E}_{s1,T}(\mathbf{r}, \omega)$ šířící se od spodního rozhraní kovové vrstvy k hornímu je součtem všech možných mnohonásobných odrazů a to od prvního rozhraní s komplexním koeficientem reflektivity $r_{0,1}$ a od druhého rozhraní s komplexním koeficientem $r_{1,2}$. Vztah pro amplitudu celkového odraženého transverzálního elektrického pole od spodního rozhraní, které se dostalo k prvnímu lze vyjádřit vztahem:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{s1,T} &= \mathbf{E}_{s1,T}^1 + \mathbf{E}_{s1,T}^2 + \mathbf{E}_{s1,T}^3 \dots \\ &= \mathbf{E}_{s1,T}^1 + r_{1,2}r_{0,1}\mathbf{E}_{s1,T}^1 e^{i2\delta_{1,T}} + (r_{1,2}r_{0,1})^2\mathbf{E}_{s1,T}^1 e^{i4\delta_{1,T}} \dots \end{aligned} \quad (5.4)$$

Podobným způsobem můžeme určit celkové reflektované a transmitované pole na horním i dolním rozhraní jak pro transverzální, tak pro longitudinální pole. Odražené pole z dolního rozhraní, které dosáhne horního rozhraní, se liší od původně odražené vlny pouze fázovým faktorem. Tento fázový posun má hodnotu $\delta_{1,T} = k_{T,z}d$ v případě transverzálního pole, kde $k_{T,z}$ znamená složku vlnového vektoru ve směru osy $\hat{\mathbf{z}}$. Využijeme-li vztahy (5.1), pak můžeme zmíněné fázové změny $\delta_{1,T}$ a $\delta_{1,L}$ pro transverzální a longitudinální vlnu určit ve tvaru:

$$\delta_{1,T} = d\|\mathbf{k}_T\| \cos \alpha_{1,T}, \quad \delta_{1,L} = d\|\mathbf{k}_L\| \cos \alpha_{1,L}. \quad (5.5)$$

Z hodnot fázových odchylek můžeme získat důležité vztahy mezi jednotlivými normami amplitud polí, které jsou dány rovnicemi:

$$\mathbf{E}_{r1,T} = \mathbf{E}_{s1,T}e^{-i\delta_{1,T}}, \quad \mathbf{E}_{i1,T} = \mathbf{E}_{t1,T}e^{i\delta_{1,T}}, \quad (5.6)$$

$$\mathbf{E}_{r1,L} = \mathbf{E}_{s1,L}e^{-i\delta_{1,L}}, \quad \mathbf{E}_{i1,L} = \mathbf{E}_{t1,L}e^{i\delta_{1,L}}. \quad (5.7)$$

Na základě jednoduchých geometrických úvah podle obrázku 5.1, relací mezi velikostmi vektorů intenzity elektrického a magnetického pole pro rovinovou vlnu, můžeme určit normy amplitud celkového tečného pole (ve směru os $\hat{\mathbf{y}}$ a $\hat{\mathbf{x}}$), elektrického a magnetického pole $\mathbf{E}_{0,1} = \|\mathbf{E}_{0,1}\|$, $\mathbf{H}_{0,1} = \|\mathbf{H}_{0,1}\|$ na horním rozhraní a obdobně pro elektrická a magnetická pole $\mathbf{E}_{1,2} = \|\mathbf{E}_{1,2}\|$, $\mathbf{H}_{1,2} = \|\mathbf{H}_{1,2}\|$ na dolním rozhraní kovové vrstvy, ve formě rovnic

$$z_0^{-1}\mathbf{E}_{0,1} = \eta_0 \cos \alpha_0 (\mathbf{H}_{i0} + \mathbf{H}_{r0}), \quad (5.8)$$

$$\mathbf{E}_{0,1} = (\mathbf{E}_{t1,T} + \mathbf{E}_{s1,T}) \cos \alpha_{1,T} + (\mathbf{E}_{t1,L} + \mathbf{E}_{s1,L}) \sin \alpha_{1,L}, \quad (5.9)$$

$$\eta_0 \mathbf{H}_{0,1} = z_1^{-1} (\mathbf{E}_{t1,T} - \mathbf{E}_{s1,T}), \quad (5.10)$$

$$\mathbf{E}_{1,2} = (\mathbf{E}_{i1,T} + \mathbf{E}_{r1,T}) \cos \alpha_{1,T} + (\mathbf{E}_{i1,L} + \mathbf{E}_{r1,L}) \sin \alpha_{1,L}, \quad (5.11)$$

$$\eta_0 \mathbf{H}_{1,2} = z_1^{-1} (\mathbf{E}_{i1,T} - \mathbf{E}_{r1,T}). \quad (5.12)$$

Obdobně jako výše, \mathbf{H}_{i0} , \mathbf{H}_{r0} , $\mathbf{E}_{t1,T}$, $\mathbf{E}_{s1,T}$, $\mathbf{E}_{t1,L}$, $\mathbf{E}_{s1,L}$, $\mathbf{E}_{i1,T}$, $\mathbf{E}_{r1,T}$, $\mathbf{E}_{i1,L}$, $\mathbf{E}_{r1,L}$ jsou normy příslušných vektorových amplitud. Z rovnic hydrodynamického modelu (3.1) a (3.2) můžeme dále odvodit obecné vyjádření pro proudovou hustotu (5.13), kde $F = i(k_T^2/\mu_0\omega - \omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega))$, $S = i\omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega)$ v následující podobě

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = -F\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) + S\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega). \quad (5.13)$$

Nechť $k_{T,y}$ a $k_{L,y}$ označují y -komponenty vektorů vlnových čísel pro transverzální a longitudinální pole. Z rovnice (5.1) automaticky plyne: $k_{T,y} = k_{L,y}$. V souladu s již stanovenou konvencí definujeme dále složku vektoru proudové hustoty na úrovni horního rozhraní kovové vrstvy orientovanou v kladném směru osy $\hat{\mathbf{z}}$ jako $\mathbf{J}_u(y, \omega) \equiv \mathbf{J}_u e^{i(k_{T,y}y - \omega t)}$. Zcela analogicky též zavedme kolmou složku proudové hustoty k dolnímu rozhraní vrstvy, opět s orientací v kladném směru osy $\hat{\mathbf{z}}$, jako $\mathbf{J}_b(y, \omega) \equiv \mathbf{J}_b e^{i(k_{T,y}y - \omega t)}$. Dále zavedme normy (číselné hodnoty) normálových komponent vektorových amplitud proudových hustot následujícími symboly: $\|\mathbf{J}_u\| \equiv J_u$ a $\|\mathbf{J}_b\| \equiv J_b$, obdobně jako tomu bylo pro předchozí veličiny. Nyní můžeme využít rovnici (5.13) a stanovit okrajové podmínky pro normálovou složku proudové hustoty na rozhraních kovové vrstvy v následujícím tvaru:

$$F(E_{s1,T} - E_{t1,T}) \sin \alpha_{1,T} + S(E_{s1,L} - E_{t1,L}) \cos \alpha_{1,L} = J_u, \quad (5.14)$$

$$F(E_{r1,T} - E_{i1,T}) \sin \alpha_{1,T} + S(E_{r1,L} - E_{i1,L}) \cos \alpha_{1,L} = J_b. \quad (5.15)$$

První okrajová podmínka (5.14) určuje hodnotu normálové složky proudové hustoty směřující z horního rozhraní kovové vrstvy. Zcela analogicky je odvozena okrajová podmínka pro kolmou složku proudové hustoty na spodním rozhraní kovové vrstvy (5.15), její pravá strana však vyjadřuje velikost normálové složky proudové hustoty tekoucí z dolního rozhraní dovnitř kovové vrstvy.

Pokud je kovová vrstva obklopena dielektrickými materiály, jak je to znázorněno na obrázku 5.1, jsou J_u a J_b nulové. Na druhou stranu, pokud je jedním z okolních prostředí kov, pak lze očekávat, že přes rozhraní dvou kovových materiálů může proud protékat. Takto obecně definované okrajové podmínky nám umožňují zkoumat velmi zajímavý případ, kdy jsou dvě kovové vrstvy (dvojrstvy) ve vzájemném kontaktu a může tak docházet k novým nelokálním či kvantovým jevům jako je například tunelování. Než však bude možné se zmíněným tématem dvojrstvy zabývat, je nejprve nutné najít obecný matematický předpis pro nelokální přenosovou (charakteristickou) matici jedné kovové vrstvy. Tento krok můžeme provést bez konkrétní znalosti normálových amplitud a proudových hustot J_u a J_b na rozhraních.

5.1 Nelokální přenosová matice kovové vrstvy

Metoda přenosové matice je velmi užitečná metoda pro určování optických vlastností izotropních vrstev a jejich struktur [95–97]. Tato metoda předpokládá harmonický časově-prostorový průběh všech polí, pro obecnější závislosti je potřeba nejprve provést patřičný rozklad polí do harmonických funkcí. Přenosovou matici lze obecně definovat jako matici udávající vztah mezi tečnými elektrickými a magnetickými poli na obou rozhraních dané vrstvy. Přenosovou matici pro rovinnou vlnu o TM polarizaci a vrstvu o indexu j (myšleno ve směru dopadající vlny) má následující tvar:

$$\begin{pmatrix} E_{j-1,j} \\ \eta_0 H_{j-1,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_j & -i\gamma_j^{-1} \sin \delta_j \\ -i\gamma_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{j,j+1} \\ \eta_0 H_{j,j+1} \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

V rovnici (5.16) je symbol δ_j roven změně fáze pro transverzální pole podle (5.5), a pro symbol γ_j platí: $z_j^{-1} \cos \alpha_{j,T}^{-1}$. Velmi důležitou charakteristickou vlastností je komplexní koeficient t transmise a komplexní koeficient reflektivity r dané vrstvy. Tyto veličiny mohou být definovány pro TM polarizaci vztahy:

$$r = -\frac{H_{r0}}{H_{i0}}, \quad t = \frac{E_t}{E_{i0}} = \frac{z_t}{z_0} \frac{H_t}{H_{i0}}. \quad (5.17)$$

Předpokládejme znovu případ samostatné vrstvy obklopené nahoře prostředím o indexu 0 („superstrát“) a ze zdola prostředím o indexu 2 („substrát“). Abychom mohli určit

komplexní koeficienty transmise a reflektivita, musíme uvést další vztahy pro amplitudy polí v tečném směru k rozhraní, které jsou následující:

$$\gamma_0 E_{0,1} = \eta_0 (H_{i0} + H_{r0}), \quad (5.18)$$

$$H_{0,1} = H_{i0} - H_{r0}, \quad (5.19)$$

$$\gamma_2 E_{1,2} = \eta_0 H_{1,2} = \eta_0 H_t. \quad (5.20)$$

Pokud použijeme obecný tvar pro přenosovou matici a dodatečné vztahy (5.17) až (5.20), pak po jednoduchých algebraických úpravách získáme důležitý vztah:

$$\begin{pmatrix} \gamma_0^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} - r \begin{pmatrix} \gamma_0^{-1} \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{1,1} & m_{1,2} \\ m_{2,1} & m_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_2^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} \frac{z_0}{z_2} t. \quad (5.21)$$

Rovnice (5.21) ve své podstatě představuje soustavu dvou rovnic o dvou neznámých r a t . Řešením této soustavy získáme potřebné vztahy pro zmíněné komplexní koeficienty transmise a reflektivita [98] zkoumané rovinné vrstvy pro TM dopadající rovinnou vlnu v následující obecné formě:

$$r = \frac{\gamma_0 m_{1,1} + \gamma_0 \gamma_2 m_{1,2} - m_{2,1} - \gamma_2 m_{2,2}}{\gamma_0 m_{1,1} + \gamma_0 \gamma_2 m_{1,2} + m_{2,1} + \gamma_2 m_{2,2}}, \quad (5.22)$$

$$t = \frac{z_2}{z_0} \frac{2\gamma_2}{\gamma_0 m_{1,1} + \gamma_0 \gamma_2 m_{1,2} + m_{2,1} + \gamma_2 m_{2,2}}. \quad (5.23)$$

V případě klasického lokálního modelu můžeme rovnou do vztahů (5.22) a (5.23) dosadit jednotlivé členy přenosové matice (5.16). Vzhledem k tomu, že vztahy pro koeficienty reflektivita a transmise byly odvozeny velmi obecným způsobem, jsou platné i pro nelokální variantu přenosové matice. Nejprve je však nutné znát její konkrétní tvar.

Zaměříme se nyní na určení nelokální přenosové matice pro HD model. Tuto matici lze odvodit z rovnic (5.9) až (5.12) a okrajových podmínek pro normálovou složku proudové hustoty (5.14) a (5.15). Na uvedené rovnice lze nahlížet jako na systém šesti rovnic o šesti neznámých: $E_{r1,T}$, $E_{i1,T}$, $E_{r1,L}$, $E_{i1,L}$, $E_{0,1}$, $\eta_0 H_{0,1}$. Zbývající amplitudy jsou spjaty se zmíněnou šesticí neznámých vztahy (5.6) a (5.7). Veličiny $E_{1,2}$, $\eta_0 H_{1,2}$, J_u a J_b vystupují v příslušných rovnicích jako parametry. Naším cílem je tedy nalézt hodnoty neznámých jako lineární funkce těchto parametrů. V nejjednodušším případě je kovová vrstva obklopena dielektrikem. S ohledem na skutečnost, že se elektrony z kovu za běžných podmínek nemohou do dielektrika dostat, jsou normálové složky proudové hustoty na obou rozhraních nulové a platí tedy „hard wall“ okrajové podmínky (tzn., hodnoty dané veličiny jsou konstantní): $J_u = J_b = 0$. I v tomto nejjednodušším případě je odvození přenosové matice značně pracné a zdlouhavé, proto zde uvedeme pouze konečný výsledek.

Jednotlivé prvky přenosové matice jsou poměrně složité výrazy, a tak je uvedeme v úsporném zápisu včetně substitucí umožňující toto zjednodušení. Členy nelokální přenosové

matice pro izolovanou kovovou vrstvu jsou následující:

$$\kappa = -\frac{iF \tan \alpha_{1,L}}{S \sin \delta_{1,L}} z_1 \sin \alpha_{1,T}, \quad (5.24)$$

$$P = i \frac{\kappa \sin \delta_{1,T}}{z_1 \cos \alpha_{1,T}}, \quad (5.25)$$

$$Q = (\cos \delta_{1,L} - \cos \delta_{1,T}) \kappa, \quad (5.26)$$

$$U = (1 - \cos \delta_{1,T} \cos \delta_{1,L}) \kappa, \quad (5.27)$$

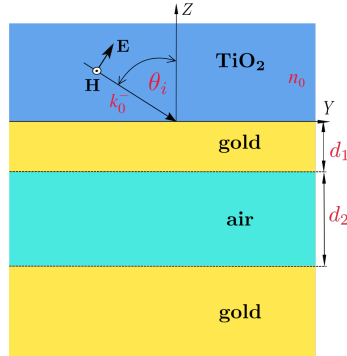
$$m_{1,1} = \cos \delta_{1,T} - \frac{i\gamma_1}{1-P} Q \sin \delta_{1,T}, \quad (5.28)$$

$$m_{1,2} = \frac{Q}{1-P} (\cos \delta_{1,T}, -P \cos \delta_{1,L}) - U - \frac{i \sin \delta_{1,T}}{\gamma_1}, \quad (5.29)$$

$$m_{2,1} = -\frac{i\gamma_1}{1-P} \sin \delta_{1,T}, \quad (5.30)$$

$$m_{2,2} = \frac{1}{1-P} (\cos \delta_{1,T} - P \cos \delta_{1,L}). \quad (5.31)$$

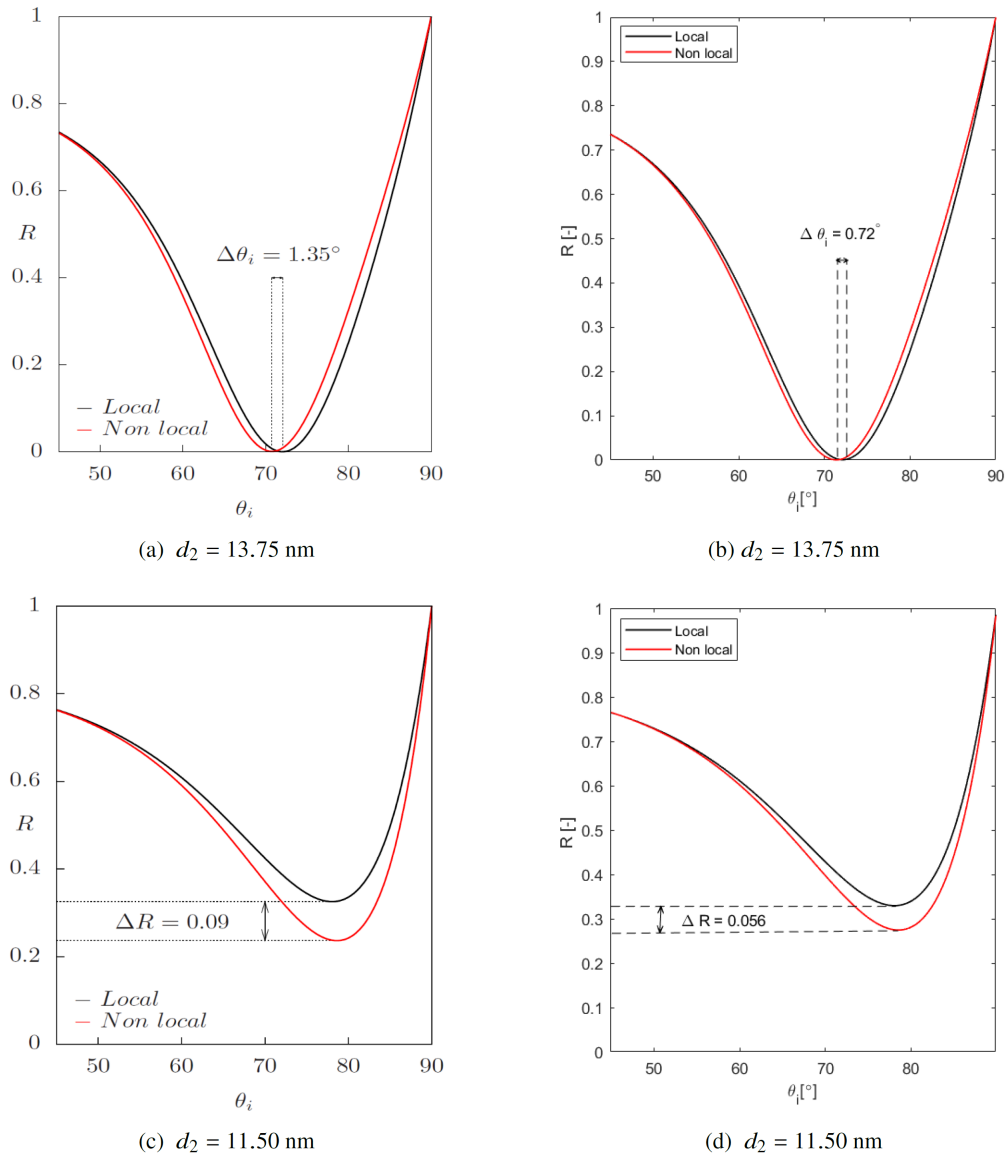
Zde uvedené teoretické vztahy je záhodno ověřit alespoň na základě porovnání vybraných výpočtů patřičných veličin s již publikovanými nelokálními simulacemi v současné vědecké literatuře. Cennou příležitostí k tomu nabízí článek [89], jenž stručnou formou prezentuje nelokální model zaměřený na nelokální odezvu metalicko-dielektrických vrstevnatých struktur, opírající se o odlišný matematický přístup popisu interakce, konkrétně o rozptylové S-matice. Zmíněný článek obsahuje mimo jiné analýzu nelokální odchylky reflektance ($R = r^*r$) provedené na takzvané MIM struktuře (Metal Insulator Metal), schematicky znázorněné na obrázku 5.2.



Obrázek 5.2: Schematické znázornění MIM struktury, zvolené pro porovnání výpočtů reflektance

Navrhované porovnání lokálního a nelokálního průběhu reflektance funkčně závisící na úhlu dopadu θ_i rovinné vlny o TM polarizaci, která interaguje se strukturou znázorněné na 5.2, je na obrázku 5.3.

Pro pohodlnější vizuální porovnání jsme použili obrázky 5.3(a) a 5.3(c) z [89], naše výpočty jsou reprezentovány obrázky 5.3(b) a 5.3(d). Jak je patrné, náš model předpovídá o něco menší odchylku reflektance. Rozdíl výsledků pravděpodobně souvisí s tím, že náš model nezanebává vliv transverzální proudové hustoty na celkovou nelokální odezvu.



Obrázek 5.3: Reflektance struktury zobrazené na obrázku 5.2 jako funkce dopadového úhlu θ_i pro dvě hodnoty d_2 . Vlnová délka dopadající rovinné vlny TM je $\lambda = 600$ nm. Médium nad vrchní vrstvou zlata je TiO₂ s indexem lomu $n_0 = \sqrt{6.78}$ a médium pod ní je vzduch. Permittivita zlata má hodnotu $\varepsilon_m = -8.44 + 1.41i$ a nelokální parametr $\beta = 1.35 \cdot 10^6$ m \cdot s⁻¹. Tloušťka horní kovové vrstvy je $d_1 = 18$ nm. Výpočty na obrázcích 5.3(a) a 5.3(c) jsou převzaty z [89].

Metoda popsaná v [94] používá k popisu interakce, namísto proudové hustoty $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$, veličinu označovanou jako efektivní polarizace $\mathbf{P}_f(\mathbf{r}, \omega)$, tu lze zavést pomocí Maxwellových rovnic ve tvaru:

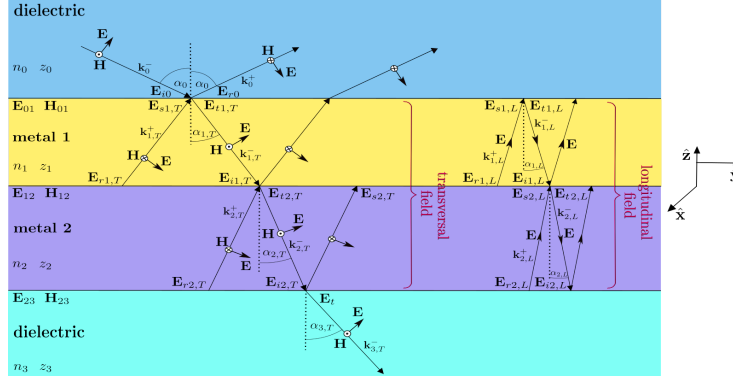
$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_m(\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \mathbf{P}_f(\mathbf{r}, \omega)). \quad (5.32)$$

Z Maxwellových rovnic a vztahu (5.32), lze odvodit konstituční relaci: $i\omega\mathbf{P}_f(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$. Jak lze z [94] usoudit, autoři článku předpokládají, že pro případ transverzálního pole (splňující $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0$) platí $\mathbf{P}_f(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{0}$. To však znamená, že $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$ v sobě zahrnuje pouze longitudinální složku proudové hustoty a tudíž není započítán vliv transverzální složky $\mathbf{J}_T(\mathbf{r}, \omega)$ proudové hustoty do celkové interakce.

Znalost konkrétní podoby přenosové matice nelokální kovové vrstvy je klíčová pro mnohé

další úvahy. V tomto smyslu se jako velice zajímavé téma nabízí interakce kovových dvojvrstev s TM rovinnou vlnou. Tento případ bude náplní následující části.

5.2 Nelokální přenosová matice kovové dvojvrstvy



Obrázek 5.4: Schematické znázornění nelokální interakce TM rovinné vlny s kovovou dvojvrstvou

Z klasického pohledu jsou všechny vlastnosti kovového materiálu zahrnuty v permitivitě tohoto materiálu, jež je funkčně závislá pouze na frekvenci. Jedná se tak o přiblížení označované zkratkou LRA (Local Response Approximation [56, 99]). Z hlediska HD modelu je celková odezva kovu na elektromagnetické pole kombinací odezvy kladně nabitého iontového pozadí kovu a interakcí volného elektronového plynu, tedy indukované proudové hustoty. Z těchto důvodů lze předpokládat, že odlišné okrajové podmínky pro proudovou hustotu, jakožto jedné z komponent kovu a tím i jeho celkové odezvy, by se měly významně projevit v celkovém chování kovové vrstvy jako celku. Nejjednodušší strukturou, na které lze zkoumat vliv okrajových podmínek proudových hustot, je kovová dvojvrstva obklopená dielektrickými médii, a tak je logicky naším cílem právě teoretický popis této struktury.

Než se pustíme do rozboru problému, je potřeba uvést indexovou notaci. Označme první kovovou vrstvu indexem 1 a kovovou vrstvu pod ní indexem 2 podle obr. 5.4. Veličiny příslušející dané vrstvě označme stejným indexem jako daná vrstva. Jako první krok k řešení výše uvedeného problému musíme vyšetřit obecný případ kovové vrstvy s nenulovými okrajovými podmínkami (5.14) a (5.15). Tyto nenulové podmínky mění vztah mezi amplitudami tečných polí na okrajích kovové vrstvy, v případě první vrstvy to můžeme zapsat následovně:

$$\begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N_{E,1} \\ N_{H,1} \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Matice M_1 v (5.33) má stejný tvar jako v již diskutovaném případě izolovaných kovových vrstev. Jednotlivé prvky M_1 jsou tedy stále definovány výrazy (5.28) až (5.31), avšak původní vztah mezi tečnými složkami polí v podobě M_1 bylo nutné doplnit o vektor N_1 zajišťující splnění nových okrajových podmínek pro proudovou hustotu. V obecné podobě

lze vektor N_1 definovat výrazy (5.34) a (5.35):

$$N_{E,1} = (\cos \delta_{1,L} - \cos \delta_{1,T})\xi J_{1u} - (1 - \cos \delta_{1,L} \cos \delta_{1,T})\xi J_{1b} \quad (5.34)$$

$$+ \frac{i\gamma_1}{1-P}\xi Q \sin \delta_{1,T} (J_{1u} - \cos \delta_{1,L} J_{1b}),$$

$$N_{H,1} = \frac{i\gamma_1}{1-P}\xi \sin \delta_{1,T} (J_{1u} - \cos \delta_{1,L} J_{1b}), \quad (5.35)$$

$$\xi = -\frac{i \tan \alpha_{1,L}}{S \sin \delta_{1,L}}. \quad (5.36)$$

Uvedené vztahy (5.34) a (5.35) lze mimo jiné použít k popisu prostřední kovové vrstvy v případě struktury složené ze tří kovových vrstev, takzvané kovové trojvrstvy. V případě kovové dvojrstvy je však první kovová vrstva shora obklopena dielektrickým prostředím, a tudíž platí: $J_{1u} = 0$. Pro další postup je výhodné zavést maticový výraz vektoru N_1 , kde maticové prvky $\Gamma_1, \Pi_1, \Theta_1$, a Ω_1 jsou dány rovnicemi (5.34) a (5.35), následovně:

$$\begin{pmatrix} N_{E,1} \\ N_{H,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Pi_1 \\ \Theta_1 & \Omega_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{1u} \\ J_{1b} \end{pmatrix}. \quad (5.37)$$

Vyvstává však otázka, jak určit normálovou složku proudové hustoty J_{1b} na společném rozhraní kovové dvojrstvy. Odpověď nám může poskytnout následující jednoduchá úvaha. Uvažujme kovovou dvojrstvu jako na obrázku 5.4 a předpokládejme v obou kovech, na jejich společném rozhraní, odlišnou velikost proudové hustoty v tečném směru, ale stejnou ve směru kolmém. Vzhledem ke skutečnosti, že v obou kovech platí pro proudovou hustotu rovnice kontinuity $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = 0$, měla by být splněna nezávisle na volbě kartézské soustavy. Lze se přesvědčit, že divergence proudové hustoty v bodě na společném rozhraní kovových vrstev má konečnou hodnotu v kartézské soustavě definované osami $\hat{\mathbf{y}}$ a $\hat{\mathbf{z}}$. Problém však nastává, pokud bychom chtěli vypočítat divergenci v kartézské soustavě potočené oproti původní. Toto tvrzení zasluhuje podrobnější rozbor.

Definujme osy obecné kartézské soustavy: $\hat{\xi}_1 = \hat{\mathbf{a}} + y\mathbf{p}_y + z\mathbf{u}_z$ a $\hat{\xi}_2 = \hat{\mathbf{a}} + y\mathbf{u}_y - z\mathbf{p}_z$, kde $\|\mathbf{p}_y\| = \|\mathbf{p}_z\|$ a $\|\mathbf{u}_y\| = \|\mathbf{u}_z\|$, počátek soustavy je v bodě $\hat{\mathbf{a}}$, jenž je na okraji obou kovových vrstev. Pokusíme se nyní vypočítat časovou změnu hustoty náboje pomocí divergence proudové hustoty v okolí bodu $\hat{\mathbf{a}}$ v nové kartézské soustavě. Tuto změnu je možné vyjádřit pomocí transformace divergence z původní kartézské soustavy do nové a to limitním přechodem s nekonečně malými posuny y a z ve směrech původních os $\hat{\mathbf{y}}$ a $\hat{\mathbf{z}}$, takto získáme:

$$\begin{aligned} \nabla_{\xi} \cdot \mathbf{J}_{\xi}(\mathbf{r}, t) &= \quad (5.38) \\ \lim_{y \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\|\mathbf{p}_y\|y} (J_{y,1}(\hat{\mathbf{a}} - y\mathbf{p}_y, t) - J_{y,2}(\hat{\mathbf{a}} + y\mathbf{p}_y, t)) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2\|\mathbf{u}_y\|y} (J_{y,1}(\hat{\mathbf{a}} + y\mathbf{u}_y, t) - J_{y,2}(\hat{\mathbf{a}} - y\mathbf{u}_y, t)) \right) + \\ \lim_{z \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\|\mathbf{u}_z\|z} (J_{z,1}(\hat{\mathbf{a}} + z\mathbf{u}_z, t) - J_{z,2}(\hat{\mathbf{a}} - z\mathbf{u}_z, t)) - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2\|\mathbf{p}_z\|z} (J_{z,1}(\hat{\mathbf{a}} + z\mathbf{p}_z, t) - J_{z,2}(\hat{\mathbf{a}} - z\mathbf{p}_z, t)) \right) = -\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Druhá limita v (5.38) je rovna konečnému číslu kvůli předpokladu spojitosti normálových složek proudové hustoty na rozhraní, avšak první limita diverguje kvůli předpokladu různých hodnot tečných složek proudové hustoty. Nespojitosť tečných složek proudových hustot ve svém důsledku znamená nekonečně velkou časovou změnu hustoty náboje $\partial \rho(\mathbf{r}, t) / \partial t$

v bodě $\hat{\mathbf{a}}$, což je nefyzikální výsledek. Jediným způsobem, jak se tomuto problému vyhnout, je zavedení dalších okrajových podmínek definujících spojitost tečné složky proudových hustot na společném rozhraní kovových vrstev. Tyto nově zavedené okrajové podmínky jsou vlastně dodatečnými vztahy, které již umožňují určit složku proudové hustoty v kolmém směru k rozhraní.

Nyní je možné navázat na předchozí postup, spojitost normálových složek proudové hustoty lze definovat pomocí rovnic (5.14) a (5.15). Vrchní kovová vrstva dvojrstvy má nenulovou normálovou proudovou hustotu na spodním okraji, to odpovídá rovnici (5.15) s příslušnými parametry o indexu 1. Naproti tomu spodní kovová vrstva má nenulovou hodnotu J_u , což lze popsat rovnicí (5.14) s odpovídajícím indexem 2. Tak získáme okrajovou podmínku spojitosti normálových komponent proudové hustoty ve tvaru (5.39)

$$\begin{aligned} J_{2u} &= F_2(E_{s2,T} - E_{t2,T}) \sin \alpha_{2,T} + S_2(E_{s2,L} - E_{t2,L}) \cos \alpha_{2,L} = \\ &F_1(E_{r1,T} - E_{i1,T}) \sin \alpha_{1,T} + S_1(E_{r1,L} - E_{i1,L}) \cos \alpha_{1,L} = J_{1b}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Hodnoty sinusových funkcí pro okrajovou podmínku (5.39) získáme jednoduchou úpravou rovnice (5.1), konkrétně ve tvaru:

$$\sin \alpha_{2,T} = \frac{k_{T,1}}{k_{T,2}} \sin \alpha_{1,T}, \quad \sin \alpha_{2,L} = \frac{k_{L,1}}{k_{L,2}} \sin \alpha_{1,T}. \quad (5.40)$$

Amplitudu tečných složek proudové hustoty na společném rozhraní kovových vrstev lze získat dosazením transverzální a longitudinální složky elektrického pole $E_{1,2}$ z rovnice (5.11) do (5.13). Tečné pole $E_{1,2}$ lze však obdržet také posunutím indexů všech veličin v rovnici (5.9) o +1. Pokud z takto získané rovnice pro $E_{1,2}$ znovu vyjádříme odděleně její transverzální a longitudinální část a tu opět dosadíme do (5.13), najdeme tak nové vztahy pro tečné složky (jak pro transverzální tak longitudinální část) proudové hustoty z pohledu druhé vrstvy. Následným porovnáním výše popsaných rovnic pro tečné proudové hustoty na rozhraní dostaneme:

$$\begin{aligned} J_{t,2u} &= S_2(E_{s2,L} + E_{t2,L}) \sin \alpha_{2,L} - F_2(E_{s2,T} + E_{t2,T}) \cos \alpha_{2,T} = \\ &S_1(E_{r1,L} + E_{i1,L}) \sin \alpha_{1,L} - F_1(E_{r1,T} + E_{i1,T}) \cos \alpha_{1,T} = J_{t,1b}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Celkový model kovové dvojrstvy se tedy skládá ze dvou sad (2×6) rovnic, které samostatně popisují první a druhou kovovou vrstvu. Tyto dvě sady rovnic jsou spolu propojeny okrajovými podmínkami spojitosti proudových hustot na společném rozhraní dvojrstvy (5.39) a (5.41). První zmíněná sada rovnic se skládá ze soustavy (5.8) až (5.12). Druhou sadu získáme pouhým posunutím indexů všech veličin v první sadě s výjimkou veličiny impedance vakua η_0 . Uvažované soustavy rovnic spolu s okrajovou podmínkou spojitosti tečné složky proudové hustoty již umožňují určit normálovou složku proudové hustoty na rozhraní jako lineární kombinaci amplitud $H_{0,1}$, $H_{2,3}$, $E_{1,2}$ a $H_{1,2}$. Odvození tohoto důležitého vztahu je poměrně zdlouhavé, ale přímočaré. Uvedeme zde proto pouze následující výsledek:

$$\begin{aligned} J_{1b} &= \frac{\vartheta_1 \eta_0}{\nu_{1,2}} H_{0,1} + \frac{\eta_0}{\nu_{1,2}} (p_{1,2} \vartheta_2 + q_{1,2} \vartheta_2) H_{2,3} - \frac{\sigma_{1,2}}{\nu_{1,2}} E_{1,2} \\ &- \frac{\eta_0}{\nu_{1,2}} (\zeta_{1,2} + \vartheta_1 e^{-i\delta_{1,L}} + p_{1,2} \vartheta_2 e^{i\delta_{2,L}} + q_{1,2} \vartheta_2 e^{-i\delta_{2,L}}) H_{1,2}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Vzorec (5.42) je samozřejmě platný také pro J_{2u} . Kvůli složitosti samotného vztahu byly

použity níže uvedené substituce (5.43) až (5.49):

$$\vartheta_1 = \frac{-iz_1 F_1 \sin \alpha_{1,T}}{2S_1 \cos \alpha_{1,L} \sin \delta_{1,L}}, \quad (5.43)$$

$$\vartheta_2 = \frac{-iz_2 F_2 \sin \alpha_{2,T}}{2S_2 \cos \alpha_{2,L} \sin \delta_{2,L}}, \quad (5.44)$$

$$\sigma_{1,2} = \frac{F_1 - F_2}{2(S_1 + F_1) \sin \alpha_{1,L}}, \quad (5.45)$$

$$p_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\frac{(S_2 + F_2) \sin \alpha_{2,L}}{(S_1 + F_1) \sin \alpha_{1,L}} + \frac{S_2 \cos \alpha_{2,L}}{S_1 \cos \alpha_{1,L}} \right), \quad (5.46)$$

$$q_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\frac{(S_2 + F_2) \sin \alpha_{2,L}}{(S_1 + F_1) \sin \alpha_{1,L}} - \frac{S_2 \cos \alpha_{2,L}}{S_1 \cos \alpha_{1,L}} \right), \quad (5.47)$$

$$\nu_{1,2} = -i \left(\frac{e^{-i\delta_{1,L}}}{2S_1 \cos \alpha_{1,L} \sin \delta_{1,L}} + \frac{p_{1,2} e^{i\delta_{2,L}} + q_{1,2} e^{-i\delta_{2,L}}}{2S_2 \cos \alpha_{2,L} \sin \delta_{2,L}} \right), \quad (5.48)$$

$$\zeta_{1,2} = \frac{1}{2S_1 \cos \alpha_{1,L}} \left(z_1 F_1 \sin \alpha_{1,T} - z_2 F_2 \sin \alpha_{2,T} \right). \quad (5.49)$$

Pro další usnadnění a zpřehlednění odvození přenosové matice dvojrstvy je vhodné upravit vztah (5.42) pomocí substitucí za komplikované vztahy do zjednodušeného tvaru:

$$J_{1b} = a_1 \eta_0 H_{0,1} - b_1 \eta_0 H_{1,2} + c_1 \eta_0 H_{2,3} - d_1 E_{1,2}. \quad (5.50)$$

Protože již známe vztah pro normálové složky proudové hustoty J_{1b} a J_{2u} , můžeme jej dosadit do (5.37) a tím určit individuální modifikační vektor pro horní vrstvu. Vzhledem k tomu, že je horní kovová vrstva shora obklopena dielektrikem, má tato vrstva nenulovou složku J_{1b} . Pro modifikační vektor první vrstvy tak získáme vztah:

$$\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Pi_1 \\ \Theta_1 & \Omega_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ J_{1b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Pi_1 a_1 \\ 0 & \Omega_1 a_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Pi_1 d_1 & \Pi_1 b_1 \\ \Omega_1 d_1 & \Omega_1 b_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + \quad (5.51)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \Pi_1 c_1 \\ 0 & \Omega_1 c_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix} = N_{1b} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} - N_{2b} \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + N_{3b} \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix}.$$

Matice N_{1b} , N_{2b} , a N_{3b} jsou pouze substitucemi za maticové členy v samotné rovnici (5.51). V případě druhé vrstvy použijeme odpovídající ekvivalent rovnice (5.37) tedy se změněnými indexy příslušných veličin z 1 na 2. Na rozdíl od první vrstvy je druhá vrstva zespodu obklopena dielektrickým prostředím a má tudíž nenulovou pouze složku J_{2u} . Zcela analogicky jako tomu bylo výše získáme matice N_{1u} , N_{2u} a N_{3u} pro druhou vrstvu:

$$\begin{pmatrix} \Gamma_2 & \Pi_2 \\ \Theta_2 & \Omega_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{2u} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma_2 a_1 \\ 0 & \Theta_2 a_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Gamma_2 d_1 & \Gamma_2 b_1 \\ \Theta_2 d_1 & \Theta_2 b_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + \quad (5.52)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \Gamma_2 c_1 \\ 0 & \Theta_2 c_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix} = N_{1u} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} - N_{2u} \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + N_{3u} \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix}.$$

Nyní se můžeme vrátit k rovnici (5.33), respektive jejímu ekvivalentu pro spodní vrstvu kovové dvojrstvy, a dosadit do něj vztah (5.52). Výše uvedeným postupem a po jednoduché úpravě získáme vztah pro tečná pole na společném rozhraní kovových vrstev, kde výraz $(I + N_{2u})^{-1}$ má význam inverzní matice k matici $(I + N_{2u})$:

$$\begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} = (I + N_{2u})^{-1} (M_2 + N_{3u}) \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix} + (I + N_{2u})^{-1} N_{1u} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix}. \quad (5.53)$$

Nyní můžeme použít obdobný postup jako výše avšak pro případ první vrstvy, dosazením (5.51) do (5.33) získáme vztah:

$$\begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix} = (M_1 - N_{2b}) \begin{pmatrix} E_{1,2} \\ \eta_0 H_{1,2} \end{pmatrix} + N_{3b} \begin{pmatrix} E_{2,3} \\ \eta_0 H_{2,3} \end{pmatrix} + N_{1b} \begin{pmatrix} E_{0,1} \\ \eta_0 H_{0,1} \end{pmatrix}. \quad (5.54)$$

Nyní zbývá dosadit vztah (5.53) do rovnice (5.54). Tím získáme relaci mezi tečnými poli na spodním a horním rozhraní dvojrstvy. Po jednoduchých algebraických úpravách lze dospět k požadovanému vztahu pro přenosovou matici dvojrstvy. Kvůli zpřehlednění je výhodné zavést substituci:

$$W = (M_1 - N_{2b})(I + N_{2u})^{-1}. \quad (5.55)$$

Pomocí substituce (5.55) lze docílit zjednodušeného vyjádření konečné podoby přenosové matice kovové dvojrstvy M_{bil} v následujícím tvaru:

$$M_{bil} = (I - WN_{1u} - N_{1b})^{-1} (W(M_2 + N_{3u}) + N_{3b}). \quad (5.56)$$

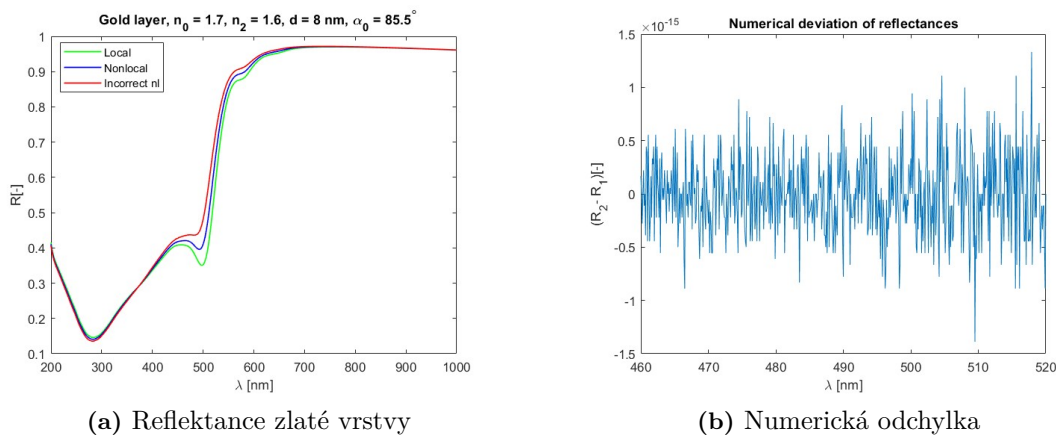
Nyní je tedy možné, díky znalosti přenosové matice M_{bil} , analyzovat vlastnosti dvou vzájemně se dotýkajících kovových vrstev. Není pochyb o tom, že dvojrstva skládající se z kovových vrstev téhož kovu musí vykazovat stejné vlastnosti jako kovová vrstva téže tloušťky jako myšlená dvojrstva. Na výsledku, ať už polí či jiných veličin charakterizujících vlastnosti jedné kovové vrstvy, by nemělo záležet na tom, zda bude pro výpočty využita přenosová matice jedné vrstvy, či bude kovová vrstva libovolným způsobem rozdělena na dvojici vrstev a bude pro výpočty využita přenosová matice dvojrstvy. Musí tudíž platit následující identity:

$$M_{bil}(d_1, d_2) = M_{one}(d_1 + d_2), \quad (5.57)$$

$$R(M_{bil}(d_1, d_2)) = R(M_{one}(d_1 + d_2)). \quad (5.58)$$

V rovnici (5.57) M_{one} představuje přenosovou matici izolované kovové vrstvy na obou stranách obklopené dielektrickými materiály. Parametry d_1 a d_2 jsou tloušťky první a druhé vrstvy, jimiž je kovová vrstva o celkové tloušťce $d = d_1 + d_2$ rozdělena.

Druhá z identit (5.58) týkající se výpočtu reflektance představuje cennou možnost, jak jednoduchým způsobem ověřit správnost zde uváděných modelů, viz obrázky 5.5 níže.



Obrázek 5.5: Porovnání reflektance zlaté vrstvy o tloušťce 8 nm. Indexy lomu prostředí nad a pod vrstvou mají hodnotu $n_0 = 1.7$, $n_2 = 1.6$. Úhel dopadu α_0 rovinné vlny TM je 85.5° . Obrázek (a) znázorňuje reflektanci jako funkci vlnové délky. Numerická odchylka reflektance (b) je vypočtena jako rozdíl $R_2 - R_1$, kde R_2 je reflektance spočtená pomocí nelokální přenosové matice dvojrstvy, přičemž R_1 náleží výpočtu nelokální reflektance pro jednu vrstvu. Použité hodnoty permitivity zlata jsou ve všech případech polynomem proložené údaje z [100].

Na obrázku 5.5 (a) je uvedeno srovnání křivek reflektance v závislosti na vlnové délce pro zlatou vrstvu o tloušťce 8 nm. Zelená křivka patří klasickému lokálnímu modelu, modrá a červená křivka nelokálnímu výpočtu, kdy je zlatá vrstva o tloušťce 8 nm fiktivně rozdělena na vrchní vrstvu silnou 2.5 nm a spodní o tloušťce 5.5 nm. Modrá křivka představuje správný způsob výpočtu, využívající nelokální přenosovou matici dvojvrstvy, dle vztahu (5.56). Červená křivka naopak naznačuje nesprávný způsob výpočtu tak, že jsou obě vzájemně se dotýkající zlaté vrstvy, fiktivní dvojvrstvy, popsány nelokální přenosovou maticí pro izolovanou vrstvy, což odpovídá situaci, kdy na společném rozhraní zlatých vrstev platí takzvaná „hard wall“ okrajová podmínka pro proudovou hustotu. Výše uvedené srovnání (červené a modré křivky) jasně ukazuje důležitost použití správných okrajových podmínek.

Obrázek 5.5 (b) ilustruje průběh numerické odchylky, definované jako rozdíl reflektance zlaté 8 nm silné vrstvy o stejných parametrech výpočtu ($n_0 = 1.7$, $n_2 = 1.6$, $\alpha_0 = 85.5^\circ$) jako v případě obrázku 5.5 (a). Reflektance R_1 patří nelokálnímu výpočtu pro jednu vrstvu zatímco R_2 odpovídá nelokální reflektanci, kdy je zlatá vrstva považovaná za dvojvrstvu o tloušťce horní vrstvy 2.5 nm a dolní o tloušťce 5.5 nm. Obě reflektance R_1 i R_2 by měly být dle identity (5.57) shodné až na numerické chyby způsobené zaokrouhlováním. Z obrázku 5.5 (b) je jasně patrná nahodilost vývoje odchylky, ta se nejčastěji nachází v intervalu $(-0, 5, 0.5) \cdot 10^{-16}$, což lze přisoudit zaokrouhlovací chybě, neboť byly výpočty provedeny v matematickém prostředí MATLAB při ponechání defaultního nastavení přesnosti na 16 desetinných míst.

5.3 Nelokální odchylka reflektance kovové vrstvy

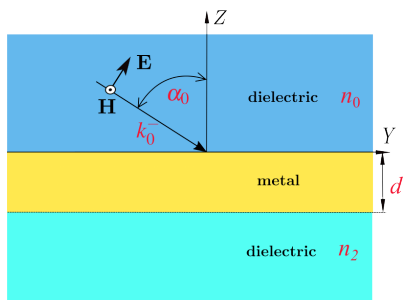
V této části se nejprve zaměříme na porovnání výpočtů podle klasické lokální a nelokální teorie založené na HD modelu. Vzhledem k tomu, že nejsilnější nelokální odchylku od klasické lokální teorie lze očekávat pro případy úhlů dopadu TM vlny na kovovou vrstvu blízké takzvanému „klouzavému“ úhlu ($\alpha_0 = 90^\circ$), musí tomuto předpokladu odpovídat i případné experimentální uspořádání. Pro praktická měření lze využít Kretschmann-Raetherovy konfigurace [101], dále však odhlédneme od úskalí experimentálního uspořádání a zaměříme se výhradně na analýzu teoretických výpočtů.

Pro optické charakterizace povrchů se běžně využívá měření reflektance, jakožto poměrně snadno měřitelné energetické veličiny. Vzhledem k této skutečnosti je záhodno se zabývat právě nelokálními vlastnostmi kovu způsobenými nelokální odchylkou reflektance od hodnot klasickou teorií předpokládaných. Připomeňme, že reflektance je definována jako $R = rr^*$, kde r je komplexní koeficient reflektivity, jenž lze určit vztahem (5.22). Kvůli zpřehlednění textu budeme dále v této kapitole nelokální odchylku reflektance často označovat jako $\Delta_{nl}R$, a kterou definujeme rozdílem: $\Delta_{nl}R = R_{HD} - R$, kde R_{HD} představuje reflektanci spočtenou zde používaným nelokálním HD modelem a R reflektanci určenou klasickým výpočtem.

Jako první krok je potřebné stanovit určité meze rozsahů hlavních parametrů, kde se teoreticky nejsilněji projeví nelokální odezva kovu a tedy dojde k zdatelné $\Delta_{nl}R$. Protože se však jedná o mnoho-parametrický problém, není otázka vhodného nastavení simulací zcela triviální. Na základě mnoha výpočtů jsme postupně (iterační cestou) určili hodnoty některých parametrů a následně je použili pro další výpočty. Po několika opakováních tohoto postupu jsme dospěli k optimálním hodnotám parametrů níže uvedených výpočtů.

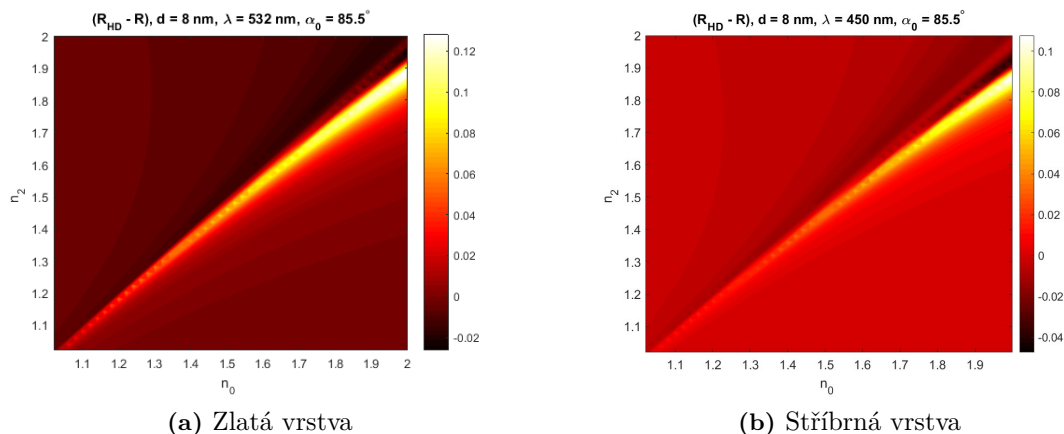
V této části jsme se zaměřili na nejjednodušší případ zobrazený na obr.5.6. Jak je na

zmíněném obrázku naznačeno, klíčovými parametry, které ovlivňují reflektanci, jsou úhel dopadu α_0 měřený od kolmice, indexy lomu n_0 a n_2 prostředí obklopujících kovovou vrstvu a tloušťka d samotné kovové vrstvy. Jako záměr jsme si stanovily provést výpočty pro realistické materiálové hodnoty indexů lomu vnějšího prostředí. Pro naši analýzu jsme zvolili zlato a stříbro jako běžně používané kovy v plazmonice. Z tohoto důvodu jsme pro výpočty zvolili rozsah hodnot indexu lomu 1 až 2. V tomto rozsahu je řada materiálů, u kterých lze imaginární část indexu lomu zanedbat.



Obrázek 5.6: Schéma analyzované struktury a hlavních parametrů interakce. TM rovinná vlna se šíří dielektrickým prostředím o indexem lomu n_0 pod úhlem dopadu α_0 vůči kovové vrstvě o tloušťce d . Prostředím pod kovovou vrstvou je dielektrikum o indexem lomu n_2 .

Pro názornost uveďme obrázky 5.7 (a) a 5.7 (b) ilustrující proces volby optimálního rozpětí hodnot indexů lomu vnějšího prostředí. Tyto výpočty ukazují, že n_0 a n_2 se nemohou příliš lišit, aby byla nelokální interakce dostatečně silná. Proto jsme pro mnoho výpočtů zvolili $n_0 = 1.7$ a $n_2 = 1.6$ jako kompromisní hodnotu pro oba analyzované kovy.

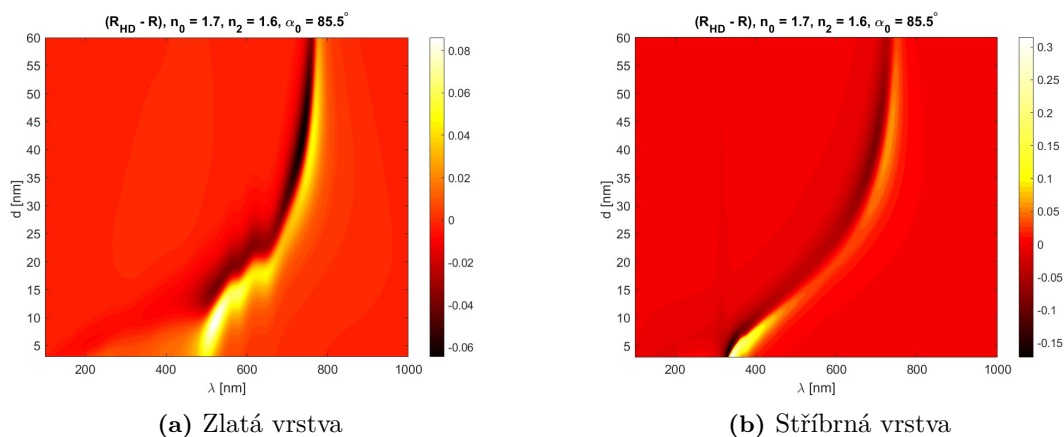


Obrázek 5.7: Závislost nelokální odchylné reflektance 8 nm silné kovové vrstvy na indexech lomu vnějších prostředí n_0 a n_2 . Úhel dopadu TM rovinné vlny je 85.5° . Vlnové délky jsou 532 nm v případě (a) zlaté vrstvy a 450 nm v případě (b) stříbrné vrstvy.

K projevům nelokálních odezvy dochází především na nanostrukturách, jejichž alespoň jeden rozměr je v řádu několika nanometrů. Pro naše výpočty jsme jako přijatelnou tloušťku zvolili $d = 8$ nm, aby nelokální interakce byly dostatečně silné a zároveň jsme mohli zanedbat kvantové jevy. Stříbrné a zlaté kovové vrstvy vykazují při stejných hodnotách parametrů (n_0 , n_2 , d , α_0) maximální nelokální odchylnou pro různé vlnové délky, jak bude patrné z 5.8 (a) a 5.8 (b), proto je nutné definovat konkrétní vlnovou λ zvláště pro oba zkoumané kovy. Pro analýzu zlaté vrstvy jsme zvolili $\lambda = 532$ nm, což odpovídá druhé harmonické frekvenci Nd:YAG laseru. V případě stříbrné vrstvy jsme zvolili $\lambda = 450$ nm, tu vyzařuje např. modrá laserová dioda. Jak bude doloženo obrázky 5.9 (a) a 5.9

(b), nelokální efekty jsou nejsilnější pokud rovinná vlna dopadá na povrch kovu pod téměř klouzavým úhlem. Proto jsme nastavili hodnotu úhlu dopadu rovinné vlny α_0 na $0.95 \cdot \pi/2 = 85.5^\circ$, jako kompromisní hodnotu pro oba kovy. Vraťme se však k prvnímu rozboru. Z obrázků 5.7 (a) a 5.7 (b) lze snadno vyčíst podobný charakter zvětšující se intenzity nelokální odchylky pro rostoucí indexy lomů n_0 a n_2 , kde je n_0 o něco větší než n_2 . Z velkého počtu našich analýz jsme zjistili, že povaha této závislosti zůstává velmi podobná, i když je posun vlnové délky v rozmezí ± 50 nm od námi vybraných vlnových délek (532 nm pro zlatou a 450 nm pro stříbrnou vrstvu).

Jednou z dalších možností rozboru je analýza velikosti odchylky reflektance v závislosti na tloušťce vrstvy a vlnové délce dopadající rovinné vlny. Tento případ ukazují obrázky 5.8 (a) pro zlatou a 5.8 (b) pro stříbrnou vrstvu. Stejně jako v předchozích výpočtech byla pro úhel dopadu TM vlny zvolena hodnota $\alpha_0 = 85.5^\circ$. Pro oba výpočty jsme nastavili indexy lomu na $n_0 = 1.7$ a $n_2 = 1.6$, což jsou hodnoty, které dle 5.7 (a) a 5.7 (b) odpovídají významné nelokální odezvě.

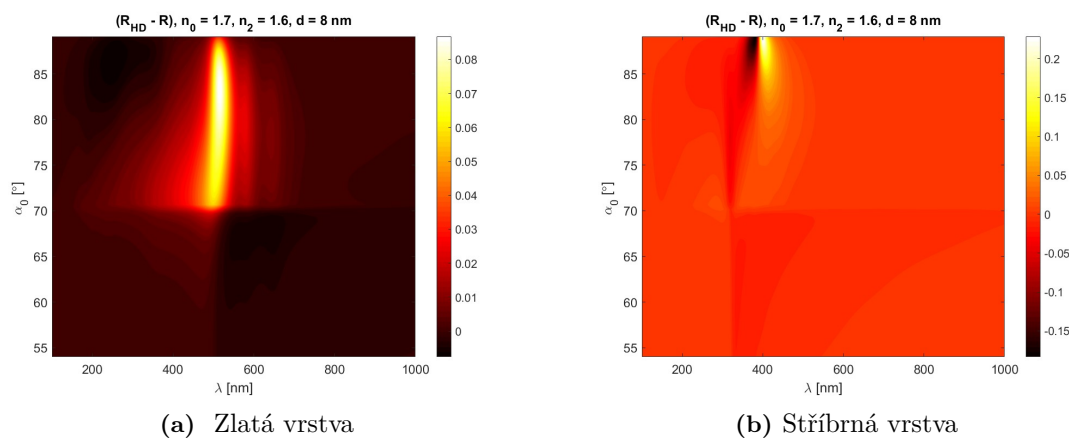


Obrázek 5.8: Závislost $\Delta_{nl}R$ zlaté (a) a stříbrné (b) vrstvy na její tloušťce a vlnové délce. Úhel dopadu TM rovinné vlny je 85.5° , indexy lomu vnějších prostředí jsou nastaveny na $n_0 = 1.7$ a $n_2 = 1.6$.

Na obou obrázcích 5.8 (a) a 5.8 (b) je jasně patrný rozsah parametrů vykazujících výraznou $\Delta_{nl}R$. V případě zlaté vrstvy, obrázek 5.8 (a), dochází k největší odchylce při tloušťce vrstvy $d = 9.5$ nm a vlnové délce 523 nm. Maximální nelokální odezva stříbrné vrstvy je dle 5.8 (b) určena parametry $d = 3$ nm a $\lambda = 339$ nm. Z obou obrázků 5.8 (a) a 5.8 (b) je též patrný posun výrazných hodnot odchylky s rostoucí tloušťkou vrstvy k delším vlnovým délkám. Z obou obrázků 5.8 (a) a 5.8 (b) vyplývá, že nezanedbatelně silnou nelokální odezvu lze předpokládat i pro vrstvy o tloušťce kolem 40 nm. V případě zlaté vrstvy o uvedené tloušťce nastává maximální odchylka, jež má hodnotu 0.049, na vlnové délce $\lambda = 761$ nm. Vlnová délka maxima nelokální odchylky stříbrné vrstvy tloušťky 40 nm je $\lambda = 728$ nm, a odchylka ($R_{HD} - R$) je rovna 0.061.

Dalším parametrem, který má vliv na sílu nelokální interakce, je úhel α_0 dopadu rovinné vlny na kovovou vrstvu. Závislost na tomto parametru ukazují obrázky 5.9 (a) pro zlatou a 5.9 (b) pro stříbrnou vrstvu. Jako druhý funkční parametr byla pro tento účel zvolena vlnová délka. Hodnoty dříve používaných parametrů jsme pro objektivnější srovnání ponechali na stejných hodnotách, konkrétně $n_0 = 1.7$, $n_2 = 1.6$, $d = 8$ nm. Z obrázků 5.9 (a) a 5.9 (b) je patrný rozsah hodnot úhlu dopadu, při kterém dochází k silné nelokální interakci. Podle našich výpočtů vykazuje zlatá vrstva nejsilnější nelokální chování kolem vlnové délky 500 nm pro úhly dopadu větší než 70 stupňů. V případě stříbrné vrstvy se

nachází výrazná odchylka v okolí vlnové délky 400 nm a v úhlovém rozsahu 80° až 90° .

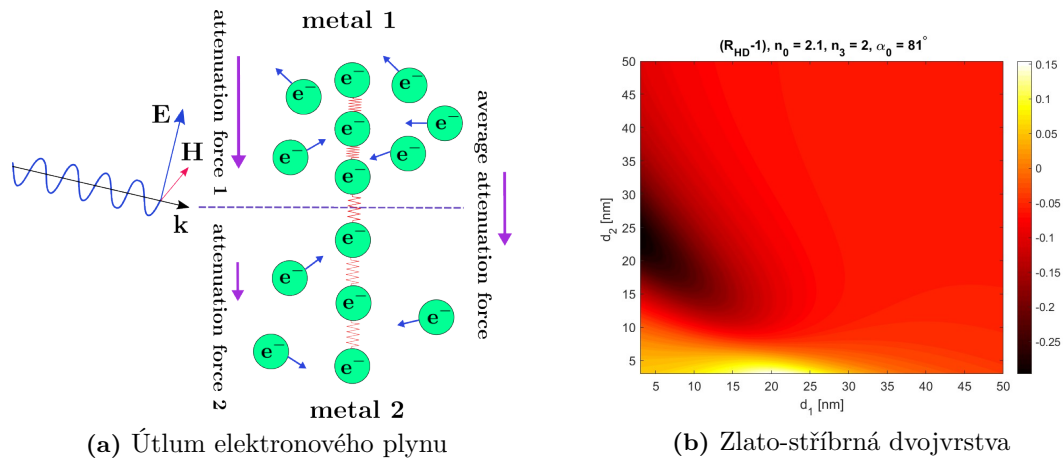


Obrázek 5.9: Závislost nelokální odchylky reflektance 8 nm tlusté (a) zlaté a (b) stříbrné vrstvy na vlnové délce a úhlu dopadu TM rovinné vlny. Indexy lomu vnějších prostředí jsou nastaveny na $n_0 = 1.7$ a $n_2 = 1.6$.

Podobnou analýzu jako zde uvedená pro jednu izolovanou kovovou vrstvu je možné provést i pro kovovou dvojvrstvou, avšak nejprve je nutno se vypořádat s problémem týkajícím se útlumové konstanty. O tom bude pojednávat navazující část.

5.4 Modifikace útlumové konstanty

Než se pustíme do komentáře k vybraným výpočtům pro kovovou dvojvrstvu, je nutné zmínit jev související s námi realizovanou korekcí útlumu. Při ověřování našeho modelu nás zajímala konkrétní situace, kdy reflektance nabývá maximální hodnoty ($R \approx 1$). Zároveň jsme se opět zaměřili na případ výrazné nelokální odezvy lze předpokládat, pokud mají indexy lomu vnějšího prostředí podobnou hodnotu. Z našich analýz lze usoudit, že tato podmínka je široce platná pro různé vlnové délky. Podle klasické teorie oba kovy, zlato i stříbro, ve formě izolované vrstvy vykazují reflektanci blízkou 1 pro parametry: $n_0 = 2.1$, $n_3 = 2$, $\alpha_0 = 81^\circ$ a tloušťku vrstvy $d \approx 8$ nm. Pokud použijeme zmíněné hodnoty parametrů pro výpočet reflektance kovové dvojvrstvy o celkové tloušťce 8 nm, zjistíme, že podle zde uváděného nelokálního modelu dvojvrstvy může reflektance přesáhnout hodnotu 1. To je znázorněno na obrázku 5.10 (b), kde d_1 označuje tloušťku horní zlaté vrstvy, d_2 označuje tloušťku spodní stříbrné vrstvy.



Obrázek 5.10: (a) Schematické znázornění mechanismu útlumu. (b) Průběh hodnoty $(R_{HD} - 1)$ jako funkce tloušťek jednotlivých kovových vrstev zlato-stříbrné dvojvrstvy, úhel dopadu a vlnová délka TM rovinné vlny jsou 81° a 900 nm. Indexy lomu vnějších prostředí jsou $n_0 = 2.1$ a $n_3 = 2$

Na první pohled se může zdát, že je náš model chybný, neb předpovídá nefyzikální výsledky v přibližném rozsahu parametrů: $d_1 \in (1, 30)$ nm, $d_2 \in (1, 8)$ nm, $\alpha_0 \approx 81^\circ$, $n_0 \approx 2.1$, $n_3 \approx 2.1$. Tyto nefyzikální výsledky mají pravděpodobně vysvětlení v komplexním procesu útlumu proudových hustot v celém objemu kovové dvojvrstvy, což nyní podrobněji rozebereme.

Obrázek 5.10 (a) ukazuje hypotetickou představu útlumu elektronového plynu. Dopadající rovinná vlna o vlnovém čísle \mathbf{k} iniciuje pohyb elektronového plynu v kovu. Takto iniciovaný pohyb elektronové hustoty je tlumen náhodnými srážkami elektronů. Dopadající vlnou indukovaná proudová hustota je v 5.10 (a) znázorněna řadou elektronů ve formě zelených kuliček spojených červenou klikatou čarou. Tato červená klikatá čára symbolizuje silovou vazbu mezi elektrony nesenou vlnami proudové hustoty buzené dopadající rovinnou vlnou. Podívejme se na dynamiku elektronového plynu z mikroskopického hlediska. Pokud je vzdálenost mezi dvěma elektrony menší než jejich „rovnovážná“ vzdálenost, jsou od sebe odpuzovány. Pokud se na druhou stranu tyto elektrony nacházejí ve větší vzdálenosti, než je jejich vzájemná rovnovážná vzdálenost, celkový systém elektronů je tak mimo rovnováhu, což má za následek působení vnějších elektronů tlačících oba zmíněné elektrony blíže k sobě. Tento proces interakce elektronového plynu znamená, že pohyb jednotlivých elektronů nelze považovat za izolované objekty a je relevantní uvažovat dynamiku elektronového plynu nebo spíše hydrodynamiku elektronové kapaliny. Ta neodvratně musí splňovat rovnici kontinuity, a to i na rozhraní kovových vrstev, jak už jsme vysvětlili v druhé podkapitole. Tudíž musí být elektronová kapalina ve všech směrech spojitá i na rozhraní kovových vrstev. Navíc se lze oprávněně domnívat, že se elektronová hustota přímo na rozhraní a v jeho blízkosti neřídí ani jedním z rozdílných HD modelů pro oba různé kovy. To jinými slovy znamená, že musíme minimálně na rozhraní uvažovat průměrnou hodnotu daných parametrů v závislosti na použitém modelu.

V této práci jsme se zaměřili pouze na dva kovové materiály zlato a stříbro, viz tabulka 3.1, jelikož mají kromě útlumu téměř shodné hodnoty hlavních parametrů HD modelu. Z tohoto důvodu se zaměříme pouze na zprůměrování konstanty útlumu. V případě jiné dvojice kovů můžeme uvažovat obdobně o zprůměrování hodnot odpovídajících parametrů těchto kovů. Z klasického pohledu je pohyb elektronové hustoty ovlivněn termodynamickými procesy vedoucími k termodynamické rovnováze, což se přeneseně projeví i na útlumové konstantě [102]. Podle Drudeho modelu [103] a dalších klasických modelů

permitivity kovu je útlumová konstanta definována jako veličina přímo úměrná srážkové frekvenci $\gamma = \frac{1}{\langle t_c \rangle}$, kde $\langle t_c \rangle$ je průměrný časový interval mezi dvěma srážkami elektronů.

Běžně uváděné hodnoty volné dráhy elektronů dle [69, 104] dosahují až 100 nm v případě ryzích ušlechtilých kovů, což znamená, že elektron může s velkou pravděpodobností volně překonat dráhu větší než je tloušťka alespoň jedné vrstvy kovové dvojvrstvy, které uvažujeme. Proto je rozumné vztáhnout srážkovou frekvenci (konstantu útlumu) alespoň k celkové tloušťce dvojvrstvy.

Předpokládejme, že dráha elektronu na vzdálenosti menší, než je volná dráha elektronu, svírá s osou \hat{y} úhel α_e . Vzhledem k okrajovým podmínkám spojitosti pro proudovou hustotu je tento úhel v obou vrstvách kovové dvojvrstvy stejný. Vzdálenost, kterou urazí elektron v první vrstvě kovu, je tedy $s_1 = d_1 \sqrt{1 + \sin^2 \alpha_e}$ a $s_2 = d_2 \sqrt{1 + \sin^2 \alpha_e}$ ve druhé vrstvě. Je-li rychlost elektronu v a srážková frekvence elektronů v prvním a v druhém kovu $\gamma_1 = 1/t_{c1}$ a $\gamma_2 = 1/t_{c2}$, pak počet srážek vztažených k danému elektronu je: $p = (s_1/v)/t_{c1} + (s_2/v)/t_{c2}$. Průměrná srážková frekvence (útlumová konstanta) elektronů ve dvojvrstvě je tedy p/t_m , kde $t_m = (s_1 + s_2)/v$ je čas pohybu elektronu. Pro naše účely postačí do prvního řádu zpřesněná útlumová konstanta:

$$\gamma_{av} = \frac{d_1 \gamma_1 + d_2 \gamma_2}{d_1 + d_2}. \quad (5.59)$$

Zprůměrování útlumové konstanty HD modelu má samozřejmě vliv na vlnová čísla podélných a transversálních polí v obou kovových vrstvách. Označíme-li indexem i kovovou vrstvu (pro horní $i = 1$, dolní $i = 2$), můžeme odvodit vyjádření transversálního a podélného vlnového čísla jako:

$$k_{Ti} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{b_i}(\omega) - \frac{\omega_{p_i}^2}{\omega(\omega + i\gamma_{av})}}, \quad (5.60)$$

$$k_{Li} = \frac{1}{\beta_i} \sqrt{\omega(\omega + i\gamma_{av}) - \frac{\omega_{p_i}^2}{\varepsilon_{b_i}(\omega)}}. \quad (5.61)$$

Výraz $\varepsilon_{b_i}(\omega)$ má význam permitivity kladně nabitého iontového pozadí kovu ve vrstvě o indexu i a permitivitě ε_{m_i} . Veličiny plazmová frekvence ω_{p_i} a konstanta útlumu γ_i představují původní nezměněné parametry HDM pro daný kov. Zbývá pouze určit permitivitu kladně nabitého pozadí obou kovů, kterou lze jednoduše odvodit ve tvaru:

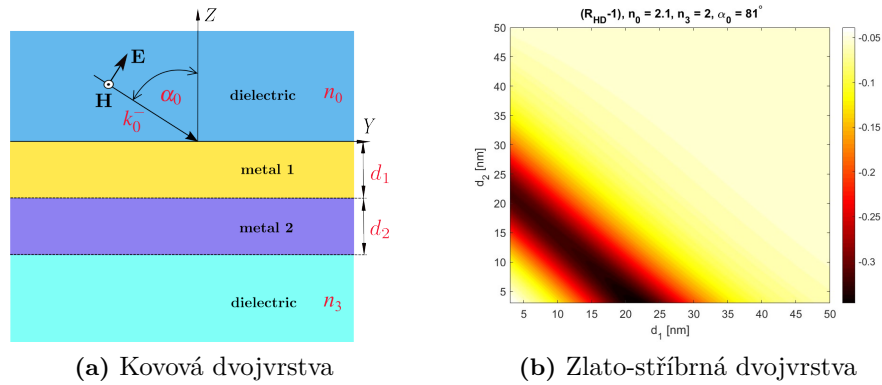
$$\varepsilon_{b_i}(\omega) = \varepsilon_{m_i}(\omega) + \frac{\omega_{p_i}^2}{\omega(\omega + i\gamma_i)}. \quad (5.62)$$

To má za následek, že na rozdíl od klasického lokálního přístupu, či nelokálního modelu pro IMI strukturu, jsou transversální vlnová čísla modifikována, tj. $k_{Ti} \neq (\omega/c) \sqrt{\varepsilon_{m_i}(\omega)}$. Jak je patrné z (5.60) a (5.61) jsou nyní vlnová čísla funkčně závislá na tloušťkách kovových vrstev.

Na základě zde navrženého postupu modifikace útlumové konstanty máme nyní možnost se zaměřit na analýzu nelokální odchylky kovové dvojvrstvy, což bude další částí této práce.

5.5 Nelokální odchylka reflektance kovové dvojvrstvy

Struktura kovové dvojvrstvy a hlavní parametry, na kterých závisí interakce, jsou znázorněny na obrázku 5.11 (a). Pro posouzení chování kovové dvojvrstvy jsme zvolili stejné výpočty odchylky reflektance jako v případě izolované kovové vrstvy.

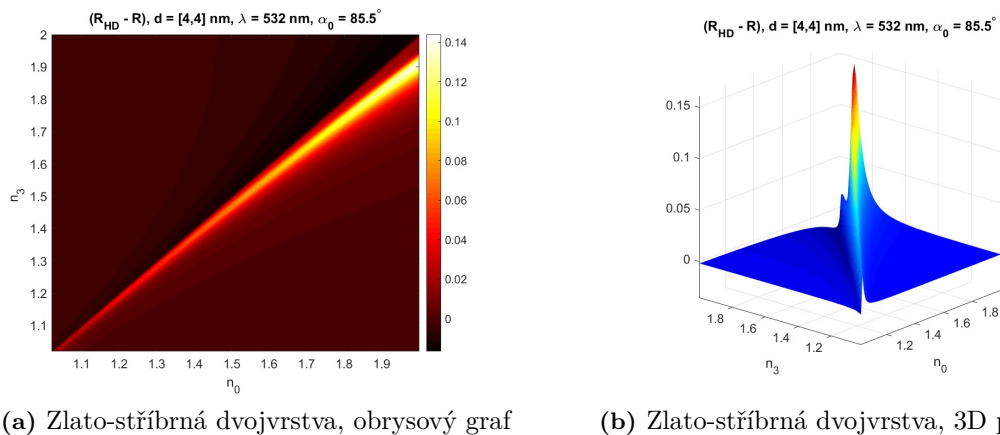


Obrázek 5.11: (a) Schéma kovové dvojrstvy a hlavních parametrů interakce: úhel dopadu TM rovinné vlny α_0 , tloušťky horní a spodní kovové vrstvy d_1 a d_2 , indexy lomů vnějších prostředí nad a pod dvojrstvou n_0 a n_3 . (b) Hodnota $(R_{HD} - 1)$ modelu HD s modifikovanou konstantou útlumu v závislosti na tloušťkách jednotlivých kovových vrstev d_1 a d_2 zlato-stříbrné dvojrstvy. Úhel dopadu a vlnová délka TM rovinné vlny jsou 81° a 900 nm. Indexy lomu vnějších prostředí jsou nastaveny na $n_0 = 2.1$ a $n_3 = 2$.

Nyní se můžeme zaměřit na porovnání výpočtu odchylny $(R_{HD} - 1)$, tedy období výpočtů na obrázku 5.10 (b), pokud se použije modifikace (průměrování) konstanty HD modelů. Jak je vidět na obrázku 5.11 (b), hodnota odchylny reflektance je záporná pro všechny kombinace tlouštěk horní zlaté a spodní stříbrné vrstvy této dvojrstvy v intervalu 3 až 50 nm. Ověřili jsme tak předpoklad, že reflektance nepřesahuje maximální hodnotu 1 v širším rozsahu vlnových délek, což jasně naznačuje, že námi navržený přístup průměrování konstanty útlumu je správnou metodou vedoucí k realistickým výsledkům.

5.5.1 Nelokální symetrické dvojrstvy

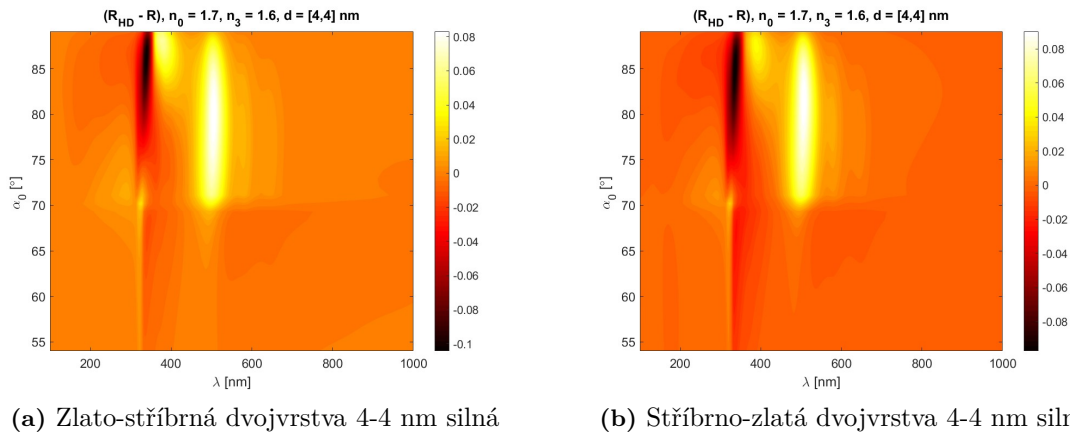
Pro ilustraci vlivu nelokální odezvy kovové dvojrstvy zde uvádíme několik výpočtů $\Delta_{nl}R$ pro zlato-stříbrné dvojrstvy, jejichž zlatá a stříbrná vrstva je stejně silná. (Simulace pro některé typy asymetrických dvojrstev čtenář najde v podsekcí Nelokální asymetrické dvojrstvy.) Obrázky 5.12 a 5.13 jsou analogické k obrázkům 5.7 (a) a 5.9 (a), pro jednu kovovou vrstvu. Ve zmíněném případě byly simulace provedeny se stejným nastavením hlavních parametrů, tj. indexů lomu, vlnové délky a úhlu dopadu rovinné vlny.



(a) Zlato-stříbrná dvojrstva, obrysový graf (b) Zlato-stříbrná dvojrstva, 3D projekce

Obrázek 5.12: Závislost $\Delta_{nl}R$ na indexech lomů vnějších prostředí n_0 a n_3 při vlnové délce 532 nm a úhlu dopadu 85.5° zobrazen jako (a) obrysový graf a (b) 3D projekce. Kovová dvojrstva má celkovou tloušťku 8 nm, zlatá a stříbrná vrstva mají stejnou tloušťku 4 nm. Pro výpočty byl použit HD model s modifikovanou útlumovou konstantou.

Jak již bylo ukázáno na obrázcích 5.7 (a) a 5.7 (b) v předešlé části kapitoly, pro specifické vlnové délky (450 nm pro stříbrnou a 532 nm pro zlatou vrstvu) existuje určitý rozsah indexů lomů vnějšího prostředí, kde lze očekávat výrazně větší nelokální odezvu. Tento rozsah hodnot indexů lomů, při daném úhlu dopadu ($\alpha_0 = 85.5^\circ$), zaujímá na obou obrázcích 5.7 (a) a 5.7 (b) zhruba podobnou oblast, a to jak pro stříbrnou, tak i zlatou vrstvu, bez ohledu na rozdílné vlnové délky. V případě kovové dvojrstvy, viz obr. 5.12 (a), je rozsah hodnot indexu lomu s očekávanou zvýšenou reflektancí mírně posunut k vyšším hodnotám indexu lomu n_0 vrchního vnějšího prostředí, stále však platí $n_3 > n_0$.



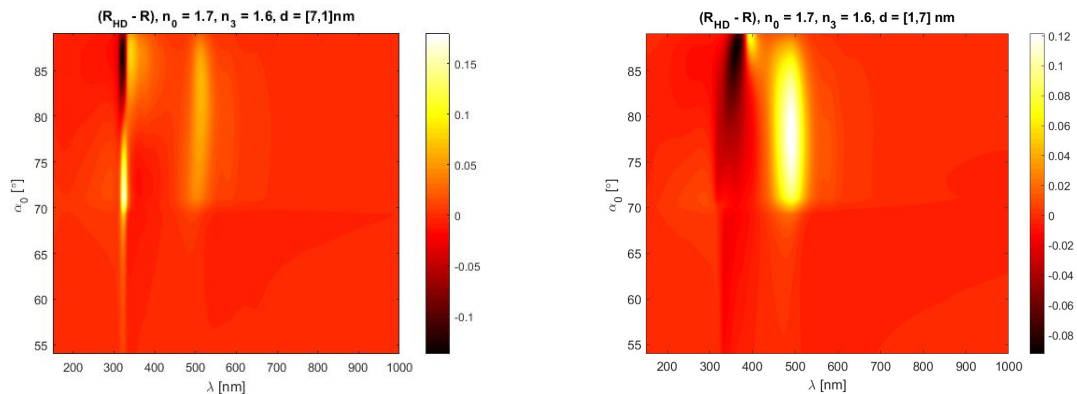
Obrázek 5.13: Závislost $\Delta_{nl}R$ na úhlu dopadu α_0 a vlnové délce λ . Obrázek (a) zlato-stříbrná dvojrstva, obrázek (b) stříbrno-zlatá dvojrstva. V obou variantách (a) i (b) má dvojrstva celkovou tloušťku 8 nm jednotlivé vrstvy jsou 4 nm silné. Indexy lomu vnějších prostředí mají hodnoty $n_0 = 1.7$ a $n_3 = 1.6$. Pro výpočty byl HD model s modifikovanou útlumovou konstantou.

Další z výše diskutovaných nelokálních charakteristik odezvy je závislost odchylky reflektance na úhlu dopadu a vlnové délce TM rovinné vlny. Grafické znázornění zmíněné odchylky $\Delta_{nl}R$ pro symetrickou zlato-stříbrnou dvojrstvu, 8 nm silnou, je uvedeno na obr. 5.13 (b) a 5.13 (a). Porovnáme-li obr. 5.13 (a) s analogickým výsledkem reflektance na obr. 5.13 (b), pro symetrickou stříbrno-zlatou dvojrstvu, tj. případ opačného pořadí vrstev, zjistíme, že rozdíly mezi těmito dvěma výsledky jsou velmi malé. Vliv zlaté vrstvy na celkovou nelokální odezvu analyzované zlato-stříbrné dvojrstvy se projevuje do značné míry v podobě obrazce definujícího maximální hodnoty odchylky, což je patrné ze srovnání obr. 5.13 (a) a obr. 5.9. Na druhé straně stříbrná vrstva přispívá k celkové nelokální odchylce dvojrstvy jiným způsobem. Vzor na obr. 5.13 (a), který je tvořen nejvýraznějšími hodnotami odchylky reflektance v rozsahu vlnových délek 330 nm až 400 nm, lze přičíst vlivu stříbrné vrstvy. Ve srovnání s obr. 5.9 (b) má obrazec zřetelné odchylky $\Delta_{nl}R$, změněnou podobu, dosahuje menšího rozpětí hodnot a je posunut ke kratším vlnovým délkám. Případ asymetrické dvojrstvy, kdy jedna z kovových vrstev kovové dvojrstvy je silnější než druhá, je stručně diskutován v následující části této kapitoly.

5.5.2 Nelokální asymetrické dvojrstvy

Abychom navázali na předešlý rozbor nelokální odchylky reflektance $\Delta_{nl}R$, zaměříme se hlavně na případ 8 nm silných dvojrstev, ale nyní složených z vrstev o síle 1 a 7 nm. Následující dva obrázky 5.14 (a) a 5.14 (b) opět ukazují vývoj odchylky $\Delta_{nl}R$ v závislosti na úhlu dopadu a vlnové délce rovinné vlny. První z dvojice obrázků 5.14 se týká dvojrstvy tvořené horní zlatou vrstvou silnou 7 nm a spodní stříbrnou vrstvou o tloušťce 1 nm. Naproti tomu obrázek 5.14 (b) se opět týká zlato-stříbrné dvojrstvy, ale s

tloušťkami 1 a 7 nm. Oba výše uvedené obrázky 5.14 (a) a 5.14 (b) ukazují, že na vlnových délkách nejsilnější nelokální odezvy má větší vliv tenčí vrstva v dané dvojrstvě.

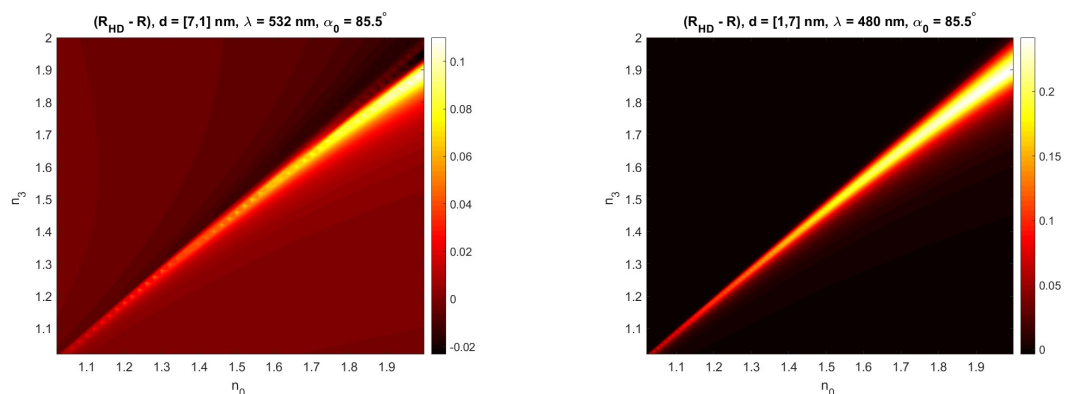


(a) Zlato-stříbrná dvojrstva 7-1 nm silná

(b) Zlato-stříbrná dvojrstva 1-7 nm silná

Obrázek 5.14: Závislost $\Delta_{nl}R$ na úhlu dopadu α_0 a vlnové délce λ . Kovová dvojrstva má celkovou tloušťku 8 nm, zlatá vrstva má tloušťku (a) 7 nm a (b) 1 nm. Indexy lomu vnějších prostředí mají hodnoty $n_0 = 1.7$ a $n_3 = 1.6$. Pro výpočty byl použit HD model s modifikovanou útlumovou konstantou.

Další dva obrázky 5.15 (a) a 5.15 (b) reprezentují závislost odchylky $\Delta_{nl}R$ zlato-stříbrné dvojrstvy funkčně závislou na hodnotách indexu lomu vnějších prostředí n_0 a n_3 , dle obr. 5.11 (a). V případě obr. 5.15 (a) jsou parametry výpočtu $\Delta_{nl}R$ následující: úhel dopadu α_0 je 85.5° , tloušťka zlaté vrstvy je 7 nm a stříbrné vrstvy 1 nm, vlnová délka λ je 532 nm. Výpočet $\Delta_{nl}R$ pro obr. 5.15 (b) byl zadán parametry: úhel dopadu α_0 je 85.5° , tloušťka zlaté vrstvy je 1 nm a stříbrné vrstvy 7 nm, vlnová délka λ na 480 nm. Důležitost použití nelokální teorie vyplývá mimo jiné z hodnot $\Delta_{nl}R$ zobrazených na 5.15 (b), z nichž je zřejmá až nečekaně silná nelokální odezva. Nyní se nabízí porovnat nelokální odezvy izolované zlaté vrstvy (obr. 5.7 (a), a zlato-stříbrné dvojrstvy obr. 5.15 (a) stejné tloušťky za stejných podmínek). Jak je z porovnání vidět, izolovaná vrstva vykazuje o něco silnější nelokální odezvu, avšak nijak zásadně.



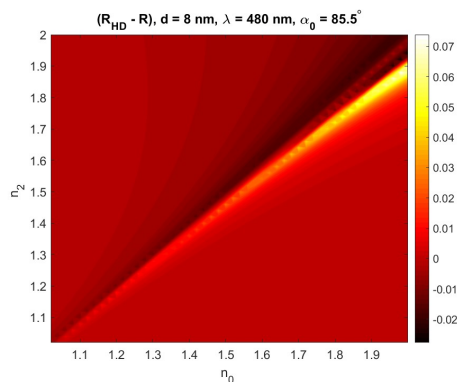
(a) Zlato-stříbrná dvojrstva 7-1 nm silná

(b) Zlato-stříbrná dvojrstva 1-7 nm silná

Obrázek 5.15: Závislost $\Delta_{nl}R$ na indexech lomu vnějších prostředí a na vlnové délce (a) 532 nm, (b) 480 nm. Úhel dopadu TM vlny je 85° . Kovová dvojrstva má celkovou tloušťku 8 nm, zlatá vrstva ve dvojrstvě má (a) 7 nm a (b) 1 nm. V případě dvojrstev (a) i (b) byl pro výpočty použit HD model s modifikovanou útlumovou konstantou.

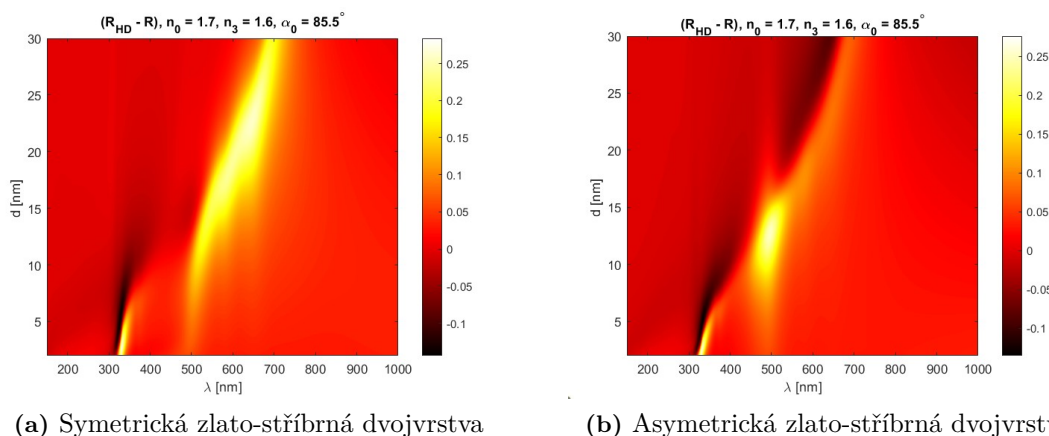
Abychom mohli provést další zajímavé porovnání, uveďme níže obrázek odchylky $\Delta_{nl}R$ izolované stříbrné vrstvy 8 nm silné, na kterou dopadá TM rovinná vlna o parametrech:

$\lambda = 480$ nm a $\alpha_0 = 85.5^\circ$. Významný rozdíl mezi obr. 5.15 (b) a obr. 5.16 lze opět přisuzovat nelokálnímu chování 1 nm silné zlaté vrstvy. Maximální odchylka reflektance na obr. 5.15 (b) dosahuje 0.242, což znamená, že nelokální model předpovídá za určitých okolností o 39.6% vyšší reflektanci v porovnání s klasickým výpočtem (kde $R \approx 0.6$).



Obrázek 5.16: Závislost $\Delta_{nl}R$ izolované stříbrné vrstvy, 8 nm silné, na indexech lomu vnějších prostředí a na vlnové délce 480 nm, úhel dopadu je 85° .

Na závěr se můžeme zaměřit na zajímavé porovnání vlivu symetrického a asymetrického uspořádání vrstev v dvojrstvě. Uvedme následující dva obrázky 5.17, ukazující odchylku reflektance zlato-stříbrné dvojrstvy na vlnové délce dopadající TM rovinné vlny a na celkové tloušťce dvojrstvy d . První obrázek 5.17 (a) znázorňuje odchylku $\Delta_{nl}R$ pro symetrický typ dvojrstev, naproti tomu obr. 5.17 (b) reprezentuje nelokální odezvu asymetrických dvojrstev skládajících se z horní zlaté vrstvy o tloušťce 1 nm a spodní stříbrné vrstvy zaujímající zbytek celkové tloušťky dvojrstvy. V obou případech obr. 5.17 (a) i (b) byly použity stejné parametry výpočtu: úhel dopadu $\alpha_0 = 85.5^\circ$ a hodnoty indexu lomu vnějších prostředí $n_0 = 1.7$, $n_3 = 1.6$.



(a) Symetrická zlato-stříbrná dvojrstva

(b) Asymetrická zlato-stříbrná dvojrstva

Obrázek 5.17: Závislost $\Delta_{nl}R$ (a) symetrické (b) asymetrické zlato-stříbrné dvojrstvy na vlnové délce dopadající TM vlny a celkové tloušťce dvojrstvy d . Úhel dopadu rovinné vlny je 85.5° , indexy lomu vnějších prostředí jsou nastaveny na $n_0 = 1.7$ a $n_2 = 1.6$.

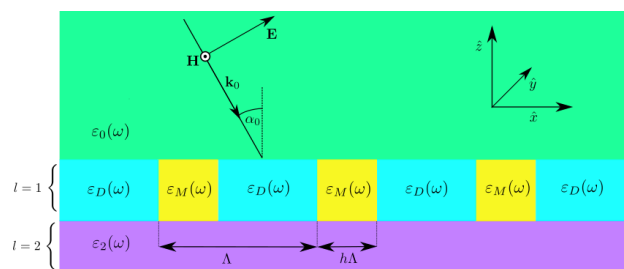
Obr. 5.17 (a) ukazuje $\Delta_{nl}R$ zlato-stříbrnou symetrickou dvojrstvu. Z porovnání 5.17 (a) s výpočty stejného typu na obr. 5.8, vztahujících se k izolované zlaté a stříbrné vrstvě, je patrné, že nelokální odezva dvojrstvy je podstatně zesílena a vykazuje odlišný charakter, než pokud by zmíněná symetrická dvojrstva interagovala způsobem podobným prosté kombinaci nelokálního chování jednotlivých izolovaných vrstev. Maximum odchylky

na obr. 5.17 (a) se nachází na $\lambda = 647$ nm a celkové tloušťce dvojvrstvy $d = 22.7$ nm a má hodnotu 0.261, což znamená zvýšenou reflektanci o 69.6% oproti klasické předpovědi. Podobným způsobem můžeme vyhodnotit obr. 5.17 (b). Náš nelokální model zde předpovídá velmi významnou odchylku reflektance blízko vlnové délky 500 nm a celkové tloušťky dvojvrstvy v rozpětí 9 až 15 nm. V maximu $\Delta_{nl}R$, které je soustředěno v okolí $\lambda = 498$ nm a $d = 12.4$ nm, viz obr. 5.17 (b), předpovídá nelokální model hodnotu reflektance vyšší o 0.248 oproti klasickému modelu, jenž udává hodnotu 0.42. To představuje navýšení o 59.4%. Dle našich výpočtů samostatná zlatá vrstva o tloušťce 1 nm nevykazuje nikterak silnou nelokální odezvu. Jak však vyplývá z rozboru, pro zde uvažované parametry indexů lomů a dopadový úhel TM vlny je v kombinaci se stříbrnou vrstvou tato odezva až překvapivě silná.

Jak bylo na základě analýzy nelokální odchylky reflektance ukázáno, celková nelokální odezva kovové dvojvrstvy je kombinací odezev jednotlivých vrstev, ale nejde jen o prosté zprůměrování. Pro podrobnější studium nelokálních odezev, zejména pro dva nelokální kovové materiály vzájemně se ovlivňující mimo jiné tokem proudových hustot, je potřeba model přesněji zachycující fyzikální realitu, jenž byl zde prezentován. Zobecníme-li uvedený model, bylo by možné jej využít pro komplexnější struktury, jako jsou například fotonické krystaly. Tato problematika je však natolik složitá, že by vyžadovala časově náročný výzkum.

Nelokální modifikace fourierovské modální metody

Fourierovské modální metody (FMM), často též označované zkratkou RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis), představují účinný nástroj popisu a simulací především periodických, difrakčních systémů, nicméně existují dobře ověřené možnosti zobecnění celého konceptu na aperiodické systémy. V současnosti je značná pozornost směřována ke snahám o rozšíření zmíněné metody na systémy s nelokálními elementy. Záměrem této kapitoly je především předložit možné návrhy na řešení některých specifických typů úloh jakožto podnět k širší diskuzi a kritickému posouzení stávajících návrhů. Na úvod je potřeba též zmínit, že přestože je metoda spjata s celou řadou dílčích, ale velmi důležitých kroků z hlediska numerické implementace, zde se zaměříme pouze na dva hlavní pilíře myšlenkového konstruktů FMM, a to na možnou modifikaci úlohy na vlastní čísla a rozptylových matic. Naším cílem tedy není řešit otázku správné faktorizace či postupů týkajících se zobecnění úlohy na aperiodické varianty [105]. Podobně jako v předchozích kapitolách podrobíme rozboru situaci, kdy dopadající TM rovinná vlna interaguje s plazmonickou strukturou, nyní však v podobě binární mřížky s periodicky se střídajícími lokálními dielektrickými a nelokálními kovovými elementy viz obrázek 6.1. Opět bude i zde využít standardní HD model k popisu nelokální odezvy uvažovaných nelokálních kovových elementů a též se budeme v dalších úvahách opírat o běžně využívané okrajové podmínky spojitosti tečných složek elektrického pole $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ a magnetického pole $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$. V případě nelokálních segmentů je ještě zapotřebí definovat dodatečné okrajové podmínky pro indukovanou proudovou hustotu $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$, pro naše úvahy bude postačující takzvaná „hard wall“ podmínka, tedy nulovost normálové složky $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$ na rozhraní, konkrétně dle obr. 6.1 na hranici kovového elementu vrstvy $l = 1$ a dielektrické vrstvy $l = 2$.



Obrázek 6.1: Schéma difrakční mřížky a dopadající TM rovinné vlny

Ve stručnosti můžeme vyjmenovat ústřední myšlenky na nichž je metoda RCWA založena

následovně. Dopadající TM rovinná vlna vybudí uvnitř i vně mřížkové struktury pole se specifickým prostorovým průběhem. Za předpokladu již ustáleného stavu interakce bude mít veškeré pole shodný dopadající vlnou vynucený časový vývoj funkce $e^{-i\omega t}$. Toto pole můžeme analyzovat v každé vrstvě zvlášť a rozložit jej do jednotlivých nezávislých módů, v našem případě se bude jednat o prostorové harmoniky. Zásadním bodem, který usnadňuje a urychluje výpočet polí a odezvy vrstvy s mřížkovou strukturou (viz obr. 6.1, vrstva o indexu $l = 1$), je Fourierův rozklad periodicky se měnící relativní permitivity této vrstvy. Každý mód pole má svoji vlastní konstantu šíření \mathbf{k}_z ve směru osy \hat{z} , jež je závislá na x-ové komponentě vlnového čísla \mathbf{k}_x a kterou můžeme určit jako hodnotu vlastního čísla k tomuto účelu navržené úlohy na vlastní čísla. Dalším krokem je určení rozptylových S-matic a následný výpočet konstantních amplitud jednotlivých módů. Jak bude níže ukázáno, konkrétní předpis S-matic vychází z okrajových podmínek na rozhraní jednotlivých vrstev pro daný segment vrstvy a tudíž zmíněný krok výpočtu konstantních amplitud je v zásadě proces vedoucí ke splnění okrajových podmínek (dle obr. 6.1 mezi vrstvami o indexu $l = 1$ a $l = 2$).

Přístupme nyní k odvození úlohy na vlastní čísla a to nejprve pro transverzální pole. Zaměříme se na vrstvu o indexu $l = 1$ na obr. 6.1. Nelokální kovové segmenty mřížky na obr. 6.1 jsou vyznačené žlutou barvou. Přestože se záhy budeme zabývat difrakčním procesem, kdy pole uvnitř i vně mřížky komplikovaným způsobem interaguje se všemi elementy mřížky a vnímá celkovým způsobem periodické změny permitivity, je prozatím zapotřebí přistupovat k popisu elektromagnetické interakce jednotlivých elementů z makroskopického hlediska, tedy jako by jejich rozměry byly podstatně větší než je vlnová délka. Přiřadíme tedy jednotlivým elementům mřížky hodnoty relativní permitivity ve smyslu materiálového složení daného místa mřížky. Ve shodě s dříve zmíněným předpokládejme harmonický časový vývoj všech polí tvaru $e^{-i\omega t}$, který je implicitně obsažen i v rovnicích standardního HD modelu [69]. Pro tento časový vývoj a dielektrické elementy mřížky o relativní permitivitě $\varepsilon_d(\omega)$ můžeme zapsat Maxwellovy rovnice v podobě vztahů (6.1) a (6.2)

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \quad (6.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_d(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.2)$$

Dále předpokládejme, nelokální elementy mřížky nechtě interagují s elektromagnetickým polem dle rovnic HD modelu, ten je možné stanovit v poněkud odlišném tvaru od běžné formulace a to níže uvedenými rovnicemi:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \quad (6.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega), \quad (6.4)$$

$$\beta^2\nabla\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma)\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_p^2\varepsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.5)$$

Využití Maxwellových rovnic (6.3), (6.4) namísto vlnové rovnice je výhodnější pro následné kroky, neboť nám to umožní řídit se postupem standardního odvození úlohy na vlastní čísla [106] pro TM polarizaci. Připomeňme zde, že na obr. 6.1 k žlutým segmentům mřížky je přiřazena veličina relativní permitivity kovu $\varepsilon_m(\omega)$, která je kombinací odezvy kladného pozadí iontů $\varepsilon_b(\omega)$ a odezvy elektronového plynu, ostatní veličiny β, ω_p a γ v (6.5) mají po řadě význam veličiny udávající sílu nelokální interakce, plazmové frekvence elektronového plynu a jeho útlum. Rovnice HD modelu, jak lze snadno ukázat, má dvě nezávislá řešení označovaná jako longitudinální a transverzální pole.

Zopakujme si základní informace, řešení HD modelu v podobě transverzálního pole je možné definovat v podobě rotace jisté vektorové funkce: $\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \xi(\mathbf{r}, \omega)$ a obdobně

lze definovat longitudinální pole jako gradient skalární funkce: $\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) = \nabla\eta(\mathbf{r}, \omega)$. Celkové řešení pole jakožto řešení HD modelu je součtem těchto na sobě nezávislých polí: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega)$. Ze základních identit operací vektorových operátorů vyplývá následující: $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega)$ a také: $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \cdot \mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega)$. Jinými slovy, operátorem rotace můžeme zacílit pouze na veličinu s prostorovo-časovým vývojem transverzálního pole a operátorem divergence pouze na veličinu longitudinálního charakteru.

6.1 Úloha na vlastní čísla pro transverzální pole

Výše zmíněných vlastností nyní s výhodou využijme, naším záměrem bude odvození rovnice pouze s jednou hledanou vektorovou transverzální veličinou. Jako ideální veličinou k tomuto se nabízí magnetické pole $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$, neboť má jasný fyzikální význam a lze snadno ukázat, že longitudinální pole nemá magnetické pole a tudíž se jedná o veličinu ryze transverzálního charakteru. Zaměříme se prvně na nelokální kovové segmenty mřížky. Dosazením polí v podobě součtu transverzálního a longitudinálního pole do (6.5) snadno získáme (6.6):

$$\beta^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) + \omega(\omega + i\gamma)(\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{J}_T(\mathbf{r}, \omega)) = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 (\mathbf{E}_L(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega)). \quad (6.6)$$

Na tomto místě je výhodné dále využít vlastností transverzálního a longitudinálního pole, jednak lze předpokládat, že obě pole mají odlišný fázový vývoj vzhledem k prostorové souřadnici a tudíž je nutné počítat odděleně s transverzální a odděleně pouze s longitudinální částí pole. Druhým argumentem, kterým lze podpořit oprávněnost tohoto kroku je to, že i přestože by měla obě pole shodná vlnová čísla, pak projekce longitudinálního pole do směru pole transverzálního by byla nulová, neboť transverzální pole míří kolmo na směr šíření zatímco longitudinální pole ve směru šíření a pole jsou tudíž na sebe kolmá. Nutně tedy z (6.6) vyplývá:

$$\omega(\omega + i\gamma)\mathbf{J}_T(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\omega_p^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.7)$$

Zaměříme se opět na transverzální pole avšak dle Maxwellovy rovnice (6.4), nahradíme-li poslední člen vztahem pro transverzální proudovou hustotu $\mathbf{J}_T(\mathbf{r}, \omega)$ z (6.7), pak po jednoduchých úpravách obdržíme:

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon_0 \left(\varepsilon_b(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \right) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\varepsilon_0 \varepsilon_M(\omega) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.8)$$

Magnetické pole má pouze charakter transverzálního pole a není jej proto potřeba doplňovat indexem T. Člen $\varepsilon_M(\omega)$ v (6.8) má význam celkové relativní permitivity kovu, jež je součtem odezvy iontového pozadí kovu $\varepsilon_b(\omega)$ a odezvy vytvářející volný elektronový plyn v interakci s dopadajícím elektromagnetickým polem. Pokud rovnici (6.8) vydělíme veličinou $\varepsilon_M(\omega)$, následně aplikujeme na celou rovnici operátor rotace a poté využijeme Maxwellovu rovnici (6.3), pak získáme následující vztah:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_M(\omega)} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right) - k_0^2 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.9)$$

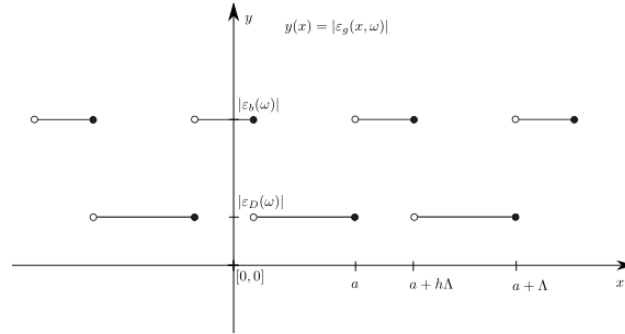
Rovnicí (6.9) se řídí transverzální pole uvnitř kovových elementů. Nyní přikročíme k popisu pouze dielektrických elementů mřížky, ty se řídí poněkud odlišnou fyzikou, nemůže v nich existovat longitudinální pole ani nelze vybudit vlnění proudové hustoty ve smyslu pohybu nabitě „elektronové kapaliny“. Vynásobením rovnice (6.2) výrazem $\varepsilon_D(\omega)^{-1}$, poté aplikací operátoru rotace a nakonec dosazením za $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ dle (6.1) dostaneme:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_D(\omega)} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right) - k_0^2 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.10)$$

Vztahy (6.9) a (6.10) tedy představují rovnice, jimiž se musí řídit magnetické pole šířící se či jinak interagující v celé mřížce. Pokusme se nalézt rovnici určující souhrnně interakci magnetického pole v celé mřížce. Uvažovaná rovnice musí splňovat následující jednoznačnou podmínku, pokud by byly nahrazeny všechny dielektrické elementy mřížky (viz obr. 6.1) kovovými téhož materiálu jako ostatní, pak musí přejít rovnice charakterizující šíření magnetického pole v celé mřížce do podoby vztahu (6.9). Obdobně, pokud budou naopak všechny kovové elementy mřížky nahrazeny dielektrickými segmenty téhož materiálu, jako okolní dielektrické, pak musí přejít hledaná rovnice do podoby (6.10). Požadovaná kritéria nechtě splňuje rovnice (6.11) s nově zavedenou podle polohové souřadnice x periodickou, po částech konstantní funkcí $\varepsilon_g(x, \omega)$ ve tvaru:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_g(x, \omega)} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right) - k_0^2 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.11)$$

Porovnáním rovnice (6.11) s (6.9) a (6.10) jednoduše zjistíme definiční předpis pro nově zavedenou funkci $\varepsilon_g(x, \omega)$. Ze srovnání vyplývá, že permitivita $\varepsilon_g(x, \omega)$ musí nabývat hodnoty $\varepsilon_M(\omega)$ na podintervalu $h\Lambda$ periody Λ viz obr. 6.1 náležící kovovému segmentu a hodnoty $\varepsilon_D(\omega)$ patřící úseku s dielektrikem. Na obr. 6.2 je schematicky znázorněna absolutní hodnota zmíněné periodické funkce.



Obrázek 6.2: Ilustrativní znázornění průběhu periodických funkcí $|\varepsilon_g(x, \omega)|$ jako funkce polohové souřadnice x

Nyní můžeme přejít k dalším úpravám rovnice (6.11) s tím vědomím, že je nově zavedená permitivita $\varepsilon_g(x, \omega)$ obecně funkcí proměnné x a tudíž není možné zanedbat její parciální derivace podle x , přestože se jedná o funkci po částech konstantní. Prvně se pokusme upravit první člen rovnice (6.11) a to v intencích situace naznačené na obr. 6.1. Dopadající TM rovinná vlna má nenulovou hodnotu magnetického pole pouze ve směru osy \hat{y} , navíc je vývoj tohoto pole vztažen pouze na rovinou dopadu (určenou osami \hat{x} a \hat{z}) a nezávisí na proměnné y , z těchto předpokladů a definice operátoru rotace získáme:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon_g(x, \omega)} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(- \frac{1}{\varepsilon_g(x, \omega)} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega) \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon_g(x, \omega)} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega) \right). \quad (6.12)$$

Dosazením (6.12) do (6.11) a po provedení jednoduchých algebraických úprav a respektováním faktu, že je popis zaměřen pouze na 1D případ periodicity dle obr. 6.1 ve vrstvě o indexu $l = 1$ a tedy platností $\partial \varepsilon_g(x, \omega) / \partial z = 0$, vyjde důležitý vztah:

$$- \frac{\partial^2}{\partial z^2} \mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_g(x, \omega) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon_g(x, \omega)} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega) \right) + k_0^2 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right]. \quad (6.13)$$

Nadcházejícím krokem opět navážeme na standardní postup odvození úlohy na vlastní čísla metody RCWA. Periodicky se vyvíjející parametry materiálového prostředí, v našem případě funkcí $\varepsilon_{l,g}(x, \omega)$, $\varepsilon_{l,g}^{-1}(x, \omega)$, je výhodné vyjádřit ve formě Fourierova rozvoje:

$$\varepsilon_{l,g}(x, \omega) = \sum_m \varepsilon_{l,m} e^{imK_x x}, \quad \frac{1}{\varepsilon_{l,g}(x, \omega)} = \sum_p a_{l,p} e^{ipK_x x}. \quad (6.14)$$

Výraz K_x má význam projekce mřížkového vektoru objemové mřížky do směru osy \hat{x} . V našem případě mřížky na obr. 6.1 se jedná o mřížkový vektor mřížky o periodě Λ a tedy platí $K_x = \frac{2\pi}{\Lambda}$. Komplexní čísla $\varepsilon_{l,m}$ a $a_{l,p}$ označují jednotlivé koeficienty rozvoje, odlišná volba sčítacích indexů m a p je nutným předpokladem k tomu, aby bylo možné jednotným popisem zahrnout všechny řády Fourierova rozvoje náležící součinu příslušných funkcí s nekonečným rozvojem. Zmíněné ozřejmí následně konkrétní úpravy rovnice (6.13). Dále je potřebné rozložit elektrické a magnetické pole uvnitř mřížky ($l = 1$), v analogii s předchozím krokem do řad (6.16) a (6.17):

$$\mathbf{k}_{x,q} = \mathbf{k}_{x,0} + q\mathbf{K}_x, \quad (6.15)$$

$$\mathbf{H}_l(\mathbf{r}, \omega) = \sum_q U_{l,y,q}(z) \hat{y} e^{i\mathbf{k}_{x,q} x}, \quad (6.16)$$

$$\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, \omega) = i \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_q \left[S_{l,x,q}(z) \hat{x} + S_{l,z,q}(z) \hat{z} \right] e^{i\mathbf{k}_{x,q} x}. \quad (6.17)$$

Rozvoj (6.16) a (6.17) odpovídá konvenci časového vývoje $e^{-i\omega t}$, symboly \hat{x} , \hat{y} a \hat{z} jsou po řadě jednotkové vektory ve směru os \hat{x} , \hat{y} a \hat{z} . Složky vlnového vektoru na mřížku dopadající TM rovinné vlny ve směrech os \hat{x} a \hat{z} označme po řadě symboly $k_{x,0}$ a $k_{z,0}$. Jádry rozvoje, patřící k příslušnému fázovému členu, jsou funkce $U_{l,y,p}(z)$, $S_{l,y,p}(z)$ a $S_{l,z,p}(z)$ označované jako prostorové harmoniky. Jednotlivým módem celkového pole lze stanovit pole náležící k danému sčítacímu indexu q . Vztah (6.15) vychází z předpokladu, že pole nad mřížkou se v důsledku procesu difrakce šíří do směrů (difrakčních řádů), jež jsou určeny mřížkovou rovnicí. Pro úplnost uvedme nekonečný (Rayleighův) rozvoj pole nad mřížkou o indexu 0 a pod mřížkou o indexu 2 do jednotlivých řádů difraktovaných vln:

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{r}, \omega) = H_{inc} \hat{y} e^{i(k_{x,0} x + k_{z,0} z)} + \sum_q r_q \hat{y} e^{i(k_{x,q} x + k_{0,z,q} z)} \quad (6.18)$$

$$\mathbf{H}_2(\mathbf{r}, \omega) = \sum_q t_q \hat{y} e^{i(k_{x,q} x + k_{2,z,q} z)}. \quad (6.19)$$

Ve zmíněných vztazích (6.18) a (6.19) má H_{inc} význam amplitudy magnetického pole dopadající vlny, r_q a t_q jsou po řadě komplexní koeficienty reflexe a transmise příslušející k vlně q -tého řádu a $k_{2,z,q}$ je z -ová komponenta vlnového vektoru q -té vlny. Nyní se můžeme vrátit k odvození úlohy na vlastní čísla. Dosazením vztahů (6.14) a (6.16) do (6.13), současně uplatněním podmínky shodného fázového průběhu levé i pravé strany rovnice, v podobě $e^{i\mathbf{k}_{x,m} x}$, následným vydělením celé rovnice tímto fázovým členem a provedením jednoduchých úprav získáme:

$$k_0^{-2} U''_{l,y,m}(z) = \sum_p \varepsilon_{l,m-p} \left[\frac{k_{x,p}}{k_0} \sum_q \frac{k_{x,q}}{k_0} a_{l,p-q} U_{l,y,q}(z) - U_{l,y,p}(z) \right]. \quad (6.20)$$

Druhá parciální derivace prostorové harmoniky $U_{l,y,m}(z)$ podle z je v (6.20) symbolicky označena jako $U''_{l,y,m}(z)$. Nyní můžeme přihlédnout k předpokladu, že se náš rozbor omezuje na 1D problém a tudíž periodické funkce zavedené vztahy (6.13) vykazují periodičnost pouze ve směru osy \hat{x} a nejsou závislé na souřadnicové proměnné z . Jedinými funkcemi proměnné z v (6.20) jsou tedy $U''_{l,y,m}(z)$, $U_{l,y,q}(z)$, $U_{l,y,p}(z)$.

Číslem $2N_\lambda$ definujme, s ohledem na námi požadovanou přesnost, celkový počet (dva směry šíření vůči ose \hat{z}) vln se stejným vlnovým číslem $k_{x,q}$, které jako celek utvářejí prostorovou harmoniku $U_{l,y,q}(z)$. Dále zavedme značení, d_l necht' je tloušťka l -té vrstvy, (v případě námi zkoumané vrstvy viz obr. 6.1 $l = 1$), D_l souřadnicová vzdálenost na ose \hat{z} horního rozhraní l -té vrstvy a $D_l - d_l$ spodního rozhraní l -té vrstvy. Stanovíme-li polohu horního rozhraní první vrstvy na souřadnici $z = 0$, pak je D_l záporné číslo a platí $D_l = -\sum_{i=1}^{l-1} d_i$, kde d_i je tloušťka i -té vrstvy. Za předpokladu, že bude brána funkční proměnná z pro funkci $U_{l,y,q}(z)$ v rozsahu dané tloušťky d_l , tedy $0 < z < d_l$, pak s ohledem na zavedené značení lze předpokládat podobu řešení rovnice (6.20) v následujícím obecném tvaru:

$$U_{l,r}(z) = \sum_{f=1}^{N_\lambda} \left[W_{r,f} C_{T,l,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_{l,f}(z+(D_l-d_l))} + W_{r,f} C_{T,l,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_{l,f}(z-D_l)} \right]. \quad (6.21)$$

Rovnice (6.20) spolu s předpokládaným řešením (6.21) představuje úlohu vázaných vln, kterou je možné jednoduše převést na úlohu na vlastní čísla, z matematického pohledu je však přesnější místo označení vlastních čísel použít pojem bodové spektrum operátoru definovaného pravou stranou rovnice (6.13). Dosazením (6.21) do (6.20) a následným zúžením celé úlohy na vázané vlny se stejným fázovým průběhem vůči souřadnicové proměnné z lze zjistit, že výraz $-\vartheta_{l,f}^2$ představuje vlastní číslo (bodové spektrum) a $W_{q,f}$ je q , f -tý element matice $[W_{q,f}]$, jejíž jednotlivý f -tý sloupec je vlastním vektorem náležícím k f -tému vlastnímu číslu. Zbývající členy $C_{T,l,f}^+$ a $C_{T,l,f}^-$ mají význam koeficientů rozvoje prostorových harmonik transverzálního pole (horní index T) do vázaných vln rozkladu, jejich hodnoty se zjistí z okrajových podmínek S-maticovým algoritmem.

$$-\vartheta_{l,f}^2 W_{m,f} = \sum_p \varepsilon_{l,m-p} \left[\frac{k_{x,p}}{k_0} \sum_q \frac{k_{x,q}}{k_0} a_{l,p-q} W_{q,f} - W_{p,f} \right]. \quad (6.22)$$

Úloha na vlastní čísla (6.22), kterou jsme odvodili pro transverzální pole má, jak se lze přesvědčit, identickou podobu, jakou má tato úloha v klasickém případě standardní metody RCWA [107, 108]. Takto navržená úloha by byla špatně konvergentní, ale díky změnám v odvození došlo ke zlepšení konvergence TM polarizace [105]. Lze tedy konstatovat, že nelokální interakcí způsobená odchylka od klasické teorie je v rámci standardního HD modelu způsobena výhradně vlivem longitudinálního pole, stěžejní otázkou je tedy adekvátní popis tohoto pole v periodickém prostředí, což je cílem následující části.

6.2 Longitudinální pole v periodické difrakční mřížce

V celé této části věnované popisu longitudinálního pole v difrakční binární mřížce se omezme na situaci, kdy se nelokální elementy nacházejí pouze ve vrstvě o indexu $l = 1$ podobně jako na obr. 6.1, což nám značně usnadní analýzu problému a též zjednoduší technické značení, veškeré veličiny budou uváděny bez indexu vrstvy l . Doposud byla řešena interakce dopadající rovinné vlny s difrakční 1D mřížkou pro transverzální pole, přičemž nejvhodnější veličinou k tomuto popisu bylo magnetické pole. Obdobnými postupy jako v předchozí části lze hledat řešení pro longitudinální pole. Na první pohled by se mohlo zdát, že je k tomuto záměru vhodné využít veličiny $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ či $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$, tedy cílit na longitudinální část pole pomocí operátoru divergence, neboť divergence transverzálního pole je nulová. Tento přístup však vede k zásadním obtížím při odvození řídicí rovnice pro longitudinální pole v periodických prostředích. Matematicky správný postup by totiž vyžadoval aplikovat operátor divergence i na členy obsahující parametry prostředí, jejichž hodnoty se periodicky mění podle souřadnicové proměnné x . Nalezené rovnice by však

byly velmi komplikované a těžko řešitelné. Jedinou schůdnou cestou je využití matematicky korektního postupu rozkladu celkového pole na longitudinální a transverzální část a následně odvodit vztahy platné pro prvně zmíněnou komponentu pole. Opět vyjdeme z oprávněné představy, že můžeme nahlížet na jednotlivé střídající se segmenty nezávisle, tudíž lze odvodit řídicí rovnici pro danou veličinu odděleně pro nelokální kovový element a odděleně pro sousední, z porovnání odvozených vztahů teprve vzejde možnost zobecnění celé úlohy na periodickou strukturu v podobě mřížky.

Věnujme nyní naši pozornost pouze nelokálnímu kovovému elementu mřížky a popisu indukovaného longitudinálního pole. Prozatím můžeme považovat kovový segment jako homogenní prostředí a otázka případného „zperiodičtění“ bude následovat poté. Zaměříme-li se pouze na longitudinální komponentu pole, pak z (6.4) a faktu, že má magnetické pole výhradně transverzální charakter, ihned vyplývá:

$$i\omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega)\mathbf{E}_L(\mathbf{r},\omega) = \mathbf{J}_L(\mathbf{r},\omega). \quad (6.23)$$

Dosazením relace (6.23) do (6.6) a zaměřením se pouze na longitudinální komponentu proudové hustoty, získáme důležitý vztah:

$$\beta^2\nabla\nabla\cdot\mathbf{J}_L(\mathbf{r},\omega) + \left(\omega(\omega + i\gamma) - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_b(\omega)}\right)\mathbf{J}_L(\mathbf{r},\omega) = 0. \quad (6.24)$$

Rovnice (6.24) představuje výchozí relaci pro další úvahy možného zobecnění a odvození úlohy na vlastní čísla pro longitudinální pole. Nabízejí se dva základní režimy interakce, které ve stručnosti níže rozebereme. Vzhledem k tomu, že na tomto místě uvádíme úvahy započínajícího výzkumu, bude třeba v budoucnu mnohé hypotézy podrobit kritickému posouzení, je tudíž záhodno níže předestřený rozbor brát spíše jako podnět k dalším analýzám.

Slabá provázanost nelokálních polí

Prvně je záhodno se zabývat aproximačním předpokladem, který značným způsobem zjednoduší celou interakční úlohu. Uvažujme difrakční mřížku, viz obr. 6.1, jejíž jednotlivé nelokální kovové elementy jsou vzájemně od sebe odděleny dielektrickými dostatečné délkou. Přímý vliv longitudinálních polí z jednotlivých nelokálních elementů na jiné je pak možné považovat za zanedbatelný. Dielektrický materiál je v takovémto případě pro elektrony neprůchozím a rozhraní s kovovým elementem představuje pevnou bariérou s nulovou pravděpodobností tunelování. Longitudinální pole je ovlivněno pouze transverzálním polem, přes okrajové podmínky, nikoliv přímo longitudinálním polem jiných nelokálních elementů. Vazbu mezi longitudinálními poli zprostředkovává nepřímo pouze transverzální pole. Všechny parametry v (6.24) zůstávají konstantní na souřadnici x a nemá smysl uvažovat o jejich zobecnění na periodickou po částech konstantní funkci. Z matematického pohledu tímto způsobem definovaný problém neodpovídá úloze vázaných vln a příslušné výpočty se značně zjednoduší. Zde nastíněnému vymezení příliš neodpovídá mřížka, jejíž lokální elementy tvoří prostředí vakua, vzduchu či jiného plynu, zejména pokud je délka uvažovaného dielektrického segmentu mřížky v řádu jednotek nanometrů. Řešení rovnice (6.24) hledejme obdobně jako v případě transverzálního pole v podobě nekonečné řady. K jednoznačnému určení zmíněného TM pole postačovalo určit vývoj magnetického pole, jež má nenulovou složku pouze $\mathbf{H}_y(\mathbf{r},\omega)$, což umožnilo odvodit rovnici (6.13) skalárního tvaru. V případě vztahu (6.24) je přímočařejší počítat s vektorovou funkcí proudové hustoty. Za tímto účelem je výhodné definovat vektorové longitudinální (dolní index L) funkce rozkladu a to předpisem pro jejich z-ové a x-ové komponenty vztahy (6.25), respektive

(6.26):

$$\mathbf{J}_{L,z,q}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,q}^+ \mathbf{J}_{L,z,q}^+ e^{ik_{x,q}x + ik_0v_q(z+(D_1-d_1))} + C_{L,q}^- \mathbf{J}_{L,z,q}^- e^{ik_{x,q}x - ik_0v_q(z-D_1)} \right] \hat{z}, \quad (6.25)$$

$$\mathbf{J}_{L,x,q}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,q}^+ \mathbf{J}_{L,x,q}^+ e^{ik_{x,q}x + ik_0v_q(z+(D_1-d_1))} + C_{L,q}^- \mathbf{J}_{L,x,q}^- e^{ik_{x,q}x - ik_0v_q(z-D_1)} \right] \hat{x}. \quad (6.26)$$

Opět byla využita již zavedená konvence pro proměnnou z jako v případě vztahu (6.21). Význam značení použitý v (6.25) a (6.26) je následující, horní indexy $+$ a $-$ symbolizují kladný, respektive záporný směr postupu vektorové vlny v projekci do osy \hat{z} , konstanta šíření podél osy \hat{z} neboli z -ová komponenta vlnového čísla je k_0v_q a $k_{x,q}$ její x -ová komponenta. Zbývající výrazy $\mathbf{J}_{L,x,q}^+$, $\mathbf{J}_{L,x,q}^-$ a $\mathbf{J}_{L,z,q}^+$, $\mathbf{J}_{L,z,q}^-$ udávají amplitudy jednotlivých komponent vektorových funkcí v x -ovém respektive z -ovém směru. Celkové řešení rovnice (6.24) musí vyhovovat okrajovým podmínkám, jimiž lze přes S-maticový algoritmus určit hodnoty amplitud $C_{L,q}^+$ a $C_{L,q}^-$ mající význam koeficientů rozkladu celkového řešení do námi definovaných vektorových longitudinálních vln. Vektorová funkce proudové hustoty $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ má pak podobu:

$$\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = \sum_q \mathbf{J}_{L,z,q}(\mathbf{r}, \omega) + \sum_q \mathbf{J}_{L,x,q}(\mathbf{r}, \omega). \quad (6.27)$$

Jednotlivé vektorové funkce mají pro různé indexy q rozdílné fázové průběhy, z tohoto pohledu je možné je chápat jako nezávislé a tudíž je i matematicky důvodné se v dalším zaměřit na funkce téhož indexu q . Dosazením vztahů (6.25) a (6.26) do (6.24) získáme pro členy se stejným indexem q rovnici:

$$-\beta^2(k_0^2v_q^2 + k_{x,q}^2)\mathbf{J}_{L,q}(\mathbf{r}, \omega) + \left(\omega(\omega + i\gamma) - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_b(\omega)} \right) \mathbf{J}_{L,q}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.28)$$

Pro další postup zavedme zjednodušující značení: $\Upsilon(\omega) = \omega(\omega + i\gamma) - \omega_p^2/\varepsilon_b(\omega)$. Frekvenční závislost z -ové komponenty k_0v_q vlnového čísla q -té vlny rozvoje včetně vztahů mezi amplitudami $\mathbf{J}_{L,z,q}^+$ a $\mathbf{J}_{L,x,q}^+$ či $\mathbf{J}_{L,z,q}^-$ a $\mathbf{J}_{L,x,q}^-$ lze snadno odvodit z (6.28), takto získáme:

$$k_0v_q = \sqrt{\frac{\Upsilon(\omega)}{\beta^2} - k_{x,q}^2}, \quad \pm \frac{k_{x,q}}{k_0v_q} \mathbf{J}_{L,z,q}^\pm = \mathbf{J}_{L,x,q}^\pm. \quad (6.29)$$

Druhá z uváděných relací v (6.29) lze snadno odvodit buď z definice longitudinálního pole jako gradientu skalární funkce, či z fyzikální představy, že směr jednotlivých vln rozvoje longitudinální proudové hustoty $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ je vždy rovnoběžný se směrem šíření. Hodnoty komponent $\mathbf{J}_{L,z,q}^\pm$ mohou být libovolně zadané. Zbývá pouze určit analogické amplitudy funkcí rozkladu intenzity longitudinálního elektrického pole, což bude mimo jiné náplní další části této kapitoly. Nejdříve však bude podrobena rozboru situace, kterou je možné označit za takzvanou silnou nelokální interakci mezi nelokálními elementy.

Silná provázanost nelokálních polí

V předešlé části byl rozebrán případ, nazvaný slabá nelokální vazba, kdy lze předpokládat, že longitudinální pole v nelokálním elementu mřížky „cítí“ periodicitu materiálových parametrů pouze zprostředkovaně přes transverzální pole. Nyní se však zabýváme takovým typem difrakční mřížky pro níž lze přímý vliv periodicity prostředí na longitudinální pole připustit. Pro představu je ideální difrakční mřížka tvořená periodicky se střídajícími nelokálními kovovými segmenty. Vychází zásadní otázka, jaká je podoba řídicí rovnice pro longitudinální pole. Opět se můžeme opřít o výše zdůvodněný princip, že longitudinální pole v daném nelokálním elementu se musí řídit rovnicí (6.24) typickou pro materiálové prostředí tohoto elementu. Vzájemným porovnáním dvou variant rovnice (6.24) pro dva

nelokální kovové materiály ihned vyplyne vztah pro longitudinální proudovou hustotu v periodickém prostředí binární mřížky s nelokálními elementy a to ve tvaru rovnice (6.30):

$$\beta_g^2(x) \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) + \Upsilon_g(x, \omega) \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.30)$$

Definičními vztahy nově zavedených parametrů $\beta_g^2(x)$ a $\Upsilon_g(x, \omega)$, je-li uvažována obdoba mřížky viz. obr. 6.1 avšak pouze s nelokálními elementy, jsou relace (6.31) a (6.32):

$$\beta_g^2(x) = \beta_1^2, \quad \Upsilon_g(x, \omega) = \omega(\omega + i\gamma_1) - \frac{\omega_{p1}^2}{\varepsilon_{b1}(\omega)}, \quad (6.31)$$

$$\beta_g^2(x) = \beta_2^2, \quad \Upsilon_g(x, \omega) = \omega(\omega + i\gamma_2) - \frac{\omega_{p2}^2}{\varepsilon_{b2}(\omega)}. \quad (6.32)$$

V případě prvního vztahu (6.31) platí : $x \in (a + k\Lambda, a + (k + h)\Lambda)$ a obdobně pro druhý (6.32) : $x \in (a + (k + h)\Lambda, a + (k + 1)\Lambda)$. Rovnice (6.30), jak je uvedeno, obsahuje periodické funkce parametrů, se kterými je nutné pracovat jako s funkcemi proměnné x a této okolnosti je nutné přizpůsobit další kroky. Dříve často využívaná operace, jakou je aplikace operátoru divergence na celou rovnici, by pouze zkomplikovala samotnou úlohu. Jedinou schůdnou cestou je opět hledání řešení $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ jakožto vektorové funkce individuálně pro její složky $\mathbf{J}_{L,z}(\mathbf{r}, \omega)$ a $\mathbf{J}_{L,x}(\mathbf{r}, \omega)$. Vystává otázka jakou podobu mají mít jednotlivé složky longitudinální proudové hustoty. Inspiraci k tomuto kroku, můžeme hledat v definici tvaru předpokládaného řešení magnetického (6.16) a elektrického transverzálního pole (6.17). Zavedme tedy analogickým způsobem prostorové harmoniky $\chi_q(z)$ a $\zeta_q(z)$ náležící k danému vlnovému číslu $k_{x,q}$ a řešení pro jednotlivé složky $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$ stanovme v podobě rozvoje následovně:

$$\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{J}_{L,x}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{J}_{L,z}(\mathbf{r}, \omega) = \left(\sum_q \chi_q(z) e^{ik_{x,q}x} \right) \hat{x} + \left(\sum_q \zeta_q(z) e^{ik_{x,q}x} \right) \hat{z}. \quad (6.33)$$

Rozkladové funkce obou komponent $\mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$, jak je uvedeno v (6.33), jsou součinem jádra, jímž je daná prostorová harmonika a harmonické funkce $e^{ik_{x,q}x}$, jejíž vlnové číslo $k_{x,q}$ je dáno vztahem (6.15). Důvodem přiřazení stejného funkčního průběhu $e^{ik_{x,q}x}$ k jednotlivým harmonikám $\chi_q(z)$ a $\zeta_q(z)$, jako v případě transverzálního pole a harmonik s tímž indexem q , je požadavek na splnění okrajových podmínek, jež budou mimo jiné náplní dalších částí této kapitoly. Konkrétní předpis zmíněných prostorových harmonik $\chi_q(z)$ a $\zeta_q(z)$ bude určen z úlohy na vlastní čísla, jejíž odvození je cílem následujících kroků.

Postup je přímočarý, dosadme předpokládané řešení (6.33) do (6.30), avšak kvůli snazší kontrole správnosti matematických úprav se zaměříme nejprve na člen $\nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega)$, jehož výpočet provedme ve dvou krocích:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = \sum_q ik_{x,q} \chi_q(z) e^{ik_{x,q}x} + \sum_q \zeta'_q(z) e^{ik_{x,q}x}, \quad (6.34)$$

$$\begin{aligned} \nabla \nabla \cdot \mathbf{J}_L(\mathbf{r}, \omega) = & \left(\sum_q (ik_{x,q} \zeta'_q(z) - k_{x,q}^2 \chi_q(z)) e^{ik_{x,q}x} \right) \hat{x} + \\ & \left(\sum_q (ik_{x,q} \chi'_q(z) + \zeta''_q(z)) e^{ik_{x,q}x} \right) \hat{z}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Zderivované funkce podle z jsou symbolicky značeny čárkou. Výraz (6.35) lze zjednodušit zavedením substituce: $P_q(z) = \zeta'_q(z) + ik_{x,q} \chi_q(z)$, vektorová rovnice (6.30) vyjádřená zvlášť pro x -vou a z -vou složku, pak přejde na soustavu rovnic:

$$\beta_{l,g}^2(x) \sum_q ik_{x,q} P_q(z) e^{ik_{x,q}x} + \Upsilon_g(x, \omega) \sum_q \chi_q(z) e^{ik_{x,q}x} = 0, \quad (6.36)$$

$$\beta_{l,g}^2(x) \sum_q P'_q(z) e^{ik_{x,q}x} + \Upsilon_g(x, \omega) \sum_q \zeta_q(z) e^{ik_{x,q}x} = 0. \quad (6.37)$$

Dále se nabízí ze soustavy rovnic (6.36) a (6.37) postupně vyjádřit diferenciální rovnici pro substituční funkci $P_q(z)$. Rovnici (6.36) tedy vynásobme funkcí $\Upsilon_g^{-1}(x, \omega)$ a následně celou rovnici parciálně zderivujeme podle x , obdržíme tak:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\beta_{l,g}^2(x)}{\Upsilon_g(x, \omega)} \right) \sum_q ik_{x,q} P_q(z) e^{ik_{x,q}x} - \frac{\beta_{l,g}^2(x)}{\Upsilon_g(x, \omega)} \sum_q k_{x,q}^2 P_q(z) e^{ik_{x,q}x} + \sum_q ik_{x,q} \chi_q(z) e^{ik_{x,q}x} = 0. \quad (6.38)$$

Obdobně upravme vztah (6.37), nejprve celou rovnici vynásobme funkcí $\Upsilon_g^{-1}(x, \omega)$ a poté ji zderivujeme podle z , tím získáme:

$$\frac{\beta_{l,g}^2(x)}{\Upsilon_g(x, \omega)} \sum_q P_q''(z) e^{ik_{x,q}x} + \sum_q \zeta_q'(z) e^{ik_{x,q}x} = 0. \quad (6.39)$$

Kvůli zpřehlednění zavedme symbolické značení $Q(x, \omega) = \Upsilon_g(x, \omega) / \beta_g^2(x)$. Sečtením rovnic (6.38) a (6.39) a následným vynásobením tohoto součtu funkcí $Q(x, \omega)$, pak s využitím vztahu pro $P_q(z)$ a jednoduché úpravě dostaneme:

$$Q(x, \omega) \frac{\partial}{\partial x} (Q^{-1}(x, \omega)) \sum_q ik_{x,q} P_q(z) e^{ik_{x,q}x} + Q(x, \omega) \sum_q P_q(z) e^{ik_{x,q}x} - \sum_q k_{x,q}^2 P_q(z) e^{ik_{x,q}x} = - \sum_q P_q''(z) e^{ik_{x,q}x}. \quad (6.40)$$

Diferenciální rovnice (6.40) již obsahuje pouze jedinou neznámou funkci $P_q(z)$. V analogii s postupy týkajícími se hledání řešení pro transversální pole, je záhodno ji převést na úlohu na vlastní čísla (bodového spektra operátoru). Prvním krokem k tomuto, je provedení Fourierova rozvoje periodických funkcí $Q(x, \omega)$ a $Q^{-1}(x, \omega)$:

$$Q(x, \omega) = \sum_m Q_m e^{imK_x x}, \quad Q^{-1}(x, \omega) = \sum_p S_p e^{ipK_x x}. \quad (6.41)$$

Stejně jako v (6.14), je výrazem K_x myšlena hodnota mřížkového vektoru a též platí vztah (6.15). Podoba předpokládaného řešení $P_q(z)$ se nedílně odvíjí od rozptylové S-matice, jíž se řeší okrajové podmínky, a kterou dosud neznáme. Dopředu lze však upozornit, že konkrétní tvar S-matice, jež bude odvozen v závěru této kapitoly, nedovoluje, aby koeficienty rozvoje přiřazené k jednotlivým vázaným vlnám longitudinálního pole měly pro pevně zvolený index f stejné hodnoty pro všechna vlnová čísla $k_{x,q}$. Zavedme tedy koeficienty rozvoje longitudinálního pole (dolní index L) prostorových harmonik s dvěma indexy q i f konkrétně: $C_{L,q,f}^+$ a $C_{L,q,f}^-$. Koeficienty rozkladu je dále nutné odlišit na dvě varianty z hlediska směru šíření dané vázané vlny podél osy \hat{z} . Kladnému směru odpovídá horní index $+$ a zápornému směru horním index $-$, toto rozdělení vyplývá jako důsledek předchozího kroku doplnění koeficientů rozvoje o index q . Pokud totiž budou jednotlivým členům vlastního vektoru pro dané f přiřazena čísla $C_{L,q,f}$, tak díky tomu, že nejsou tyto koeficienty pro dané f shodné, není možné získat úlohu na vlastní čísla ve standardní podobě, a koeficienty se stanou součástí nově odvozené modifikované úlohy na vlastní čísla. To má ovšem za následek, že vlastní čísla a tedy i vlastní vektory jsou již funkčně závislé na hodnotách koeficientů rozvoje, přičemž ale není možné předpokládat jejich stejnou hodnotu pro oba zmíněné směry šíření, mají-li být splněny okrajové podmínky. Z výše zmíněných úvah, a s ohledem na zavedenou konvenci pro proměnnou z , vyplývá, že jediná přijatelná podoba funkce $P_q(z)$ z rovnice (6.40) je následující:

$$P_q(z) = \sum_{f=1}^{N_\lambda} \left[C_{L,q,f}^+ w_{q,f}^+ e^{ik_0 v_f^+ (z + (D_1 - d_1))} + C_{L,q,f}^- w_{q,f}^- e^{-ik_0 v_f^- (z - D_1)} \right]. \quad (6.42)$$

Nově zavedené symboly v (6.42) jsou analogiemi členů použitých v (6.21). Jmenovitě $w_{q,f}^+$ je q,f-tý element matice $[w_{q,f}^+]$, jejíž f-tý sloupec je vlastním vektorem náležícím k f-tému vlastnímu číslu s hodnotou $-v_f^{+2}$, jak bude níže zřejmé. Obdobné platí pro výrazy se záporným znaménkem v horním indexu.

Nyní je možné odvodit úlohu vázaných vln. Dosazením vztahů (6.41) a předpokládaného řešení (6.42) do (6.40), provedením druhé derivace podle z a vyjádřením členů se stejnou exponenciální funkcí, v našem případě s fázovým průběhem $ik_0v_f(z + (D_1 - d_1)) + ik_{x,m}x$, získáme hledanou relaci, tu je záhodno uvádět po vydělení zmíněného stejného funkčního průběhu u všech členů a výrazem $C_{L,f}^+k_0^2$ v následující podobě:

$$-v_f^{+2}C_{L,m,f}^+w_{m,f}^+ = \sum_p \left[Q_{m-p} \frac{k_{x,p}}{k_0} \sum_q S_{p-q} \frac{k_{x,q}}{k_0} C_{L,q,f}^+w_{q,f}^+ - k_0^{-2}Q_{m-p}C_{L,p,f}^+w_{p,f}^+ \right] + \frac{k_{x,m}^2}{k_0^2}C_{L,m,f}^+w_{m,f}^+. \quad (6.43)$$

$$-v_f^{-2}C_{L,m,f}^-w_{m,f}^- = \sum_p \left[Q_{m-p} \frac{k_{x,p}}{k_0} \sum_q S_{p-q} \frac{k_{x,q}}{k_0} C_{L,q,f}^-w_{q,f}^- - k_0^{-2}Q_{m-p}C_{L,p,f}^-w_{p,f}^- \right] + \frac{k_{x,m}^2}{k_0^2}C_{L,m,f}^-w_{m,f}^-. \quad (6.44)$$

Lze se snadno přesvědčit, že stejnou rovnici vázaných vln (6.43) bychom obdrželi, i pokud bychom se zaměřili na vyjádření členů obsahujících exponenciální funkci s fázovým průběhem $ik_{x,m}x - ik_0v_f(z - D_1)$.

Na základě znalosti vlastních čísel $-v_f^2$ a matice vlastních vektorů $[w_{q,f}]$, jakožto řešení rovnice (6.43), lze následně, až na neznámé koeficienty $C_{L,f}^+$ a $C_{L,f}^-$, určit funkci $P_q(z)$ a z té, dle vztahů (6.36) a (6.37), prostorové harmoniky $\chi_q(z)$ a $\zeta_q(z)$. Budou-li zohledněny obě možné hodnoty v_f^+ a to s kladným i záporným znaménkem a obdobně obě možné hodnoty i pro v_f^- , pak po jednoduchých úpravách získáme:

$$\chi_q(z) = \sum_r S_{q-r} ik_{x,r} \sum_{f=1}^{N_\lambda} \left[C_{L,r,f}^+w_{r,f}^+ \cos(k_0v_f^+(z + (D_1 - d_1))) + C_{L,r,f}^-w_{r,f}^- \cos(k_0v_f^-(z - D_1)) \right], \quad (6.45)$$

$$\zeta_q(z) = - \sum_r S_{q-r} \sum_{f=1}^{N_\lambda} \left[C_{L,r,f}^+w_{r,f}^+k_0v_f^+ \sin(k_0v_f^+(z + (D_1 - d_1))) + C_{L,r,f}^-w_{r,f}^-k_0v_f^- \sin(k_0v_f^-(z - D_1)) \right]. \quad (6.46)$$

Longitudinální proudovou hustotu respektive komponenty této vektorové veličiny $\mathbf{J}_{L,x}(\mathbf{r}, \omega)$ a $\mathbf{J}_{L,z}(\mathbf{r}, \omega)$ stanovuje vztah (6.33). Úplné vyřešení zde rozebírané interakce difrakční mřížky, obsahující nelokální kovové elementy, však vyžaduje znalost konkrétních předpisů všech složek longitudinálních i transverzálních polí, čemuž budou věnovány nadcházející části této kapitoly.

Jednotná forma předpisu polí

Pro další postup je účelné zavést jednotnou formu zápisu polí a to ze dvou důvodů, jednak se tím značně zpřehlední a zjednoduší nalezení vztahů pro zbývající veličiny polí, které dosud nebyly určeny a lze se tak vyhnout stanovení konkrétních tvarů prostorových

harmonik pro každou veličinu zvlášť. Dále je zvolený přístup výhodný pro odvození rozptylové S-matice pro nelokální element mřížky, což bude cílem další sekce. S-maticovým algoritmem se řeší okrajové podmínky výpočtem koeficientů rozkladu individuálně pro všechny kombinace indexů q a f vázaných vln zvlášť, pro které však již známe jejich amplitudy polí. Právě zjištění dosud neznámých amplitud bude náplní této části. Pro naše účely se tedy zaměříme na q, f -tou složku celkového rozvoje magnetického pole popsaného rovnicí (6.16). Magnetické pole v periodické struktuře pak můžeme zapsat jako dvojitou sumu $\mathbf{H}_{T,y}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_q \sum_{f=1}^{N_\lambda} \mathbf{H}_{T,y,q,f}(\mathbf{r}, \omega)$, přičemž $\mathbf{H}_{T,y,q,f}(\mathbf{r}, \omega)$ má podobu:

$$\mathbf{H}_{T,y,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{T,f}^+ \mathbf{H}_{T,y,q,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_f (z+(D_1-d_1))} + C_{T,f}^- \mathbf{H}_{T,y,q,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_f (z-D_1)} \right] e^{ik_x, q x \hat{x}}. \quad (6.47)$$

Výrazy $\mathbf{H}_{T,y,q,f}^+$ a $\mathbf{H}_{T,y,q,f}^-$ označují hledané amplitudy magnetického pole náležitě transverzálním vázaným vlnám q, f -tého řádu rozvoje, jejich horní indexy $+$ a $-$ udávají informaci o směru šíření v kladném či záporném směru podél osy \hat{z} . Opět byla využita zavedená konvence pro proměnnou z , které se budeme držet i nadále.

Podobně lze postupovat i v případě ostatních komponent $\mathbf{E}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{E}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{J}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{J}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)$ celkového transverzálního pole. Ty lze opět napsat jako dvojitou sumu k nim patřících q, f -tých složek, jež mají tvar:

$$\mathbf{E}_{T,x,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{T,f}^+ \mathbf{E}_{T,x,q,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_f (z+(D_1-d_1))} + C_{T,f}^- \mathbf{E}_{T,x,q,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_f (z-D_1)} \right] e^{ik_x, q x \hat{x}}, \quad (6.48)$$

$$\mathbf{E}_{T,z,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{T,f}^+ \mathbf{E}_{T,z,q,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_f (z+(D_1-d_1))} + C_{T,f}^- \mathbf{E}_{T,z,q,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_f (z-D_1)} \right] e^{ik_x, q x \hat{z}}, \quad (6.49)$$

$$\mathbf{J}_{T,x,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{T,f}^+ \mathbf{J}_{T,x,q,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_f (z+(D_1-d_1))} + C_{T,f}^- \mathbf{J}_{T,x,q,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_f (z-D_1)} \right] e^{ik_x, q x \hat{x}}, \quad (6.50)$$

$$\mathbf{J}_{T,z,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{T,f}^+ \mathbf{J}_{T,z,q,f}^+ e^{ik_0 \vartheta_f (z+(D_1-d_1))} + C_{T,f}^- \mathbf{J}_{T,z,q,f}^- e^{-ik_0 \vartheta_f (z-D_1)} \right] e^{ik_x, q x \hat{z}}. \quad (6.51)$$

Analogicky jako v (6.47) byly definovány amplitudy q, f -tého řádu i pro ostatní veličiny transverzálního pole v (6.48) až (6.51). Obdobnou formu zápisu, jaká byla výše uvedena pro transverzální pole, lze zavést pro všechny veličiny longitudinálního pole, je k tomu opět zapotřebí nově definovat amplitudy polních veličin longitudinálních vázaných vln q, f -tého řádu, konkrétně pro proudové hustoty jsou to: $\mathbf{J}_{L,x,q,f}^+$, $\mathbf{J}_{L,x,q,f}^-$, $\mathbf{J}_{L,z,q,f}^+$, $\mathbf{J}_{L,z,q,f}^-$. Tímto krokem získáme pro q, f -tý řád rozvoje pole proudové hustoty vyjádření:

$$\mathbf{J}_{L,x,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,q,f}^+ \mathbf{J}_{L,x,q,f}^+ \cos(k_0 v_f^+ (z + (D_1 - d_1))) + C_{L,q,f}^- \mathbf{J}_{L,x,q,f}^- \cos(k_0 v_f^- (z - D_1)) \right] e^{ik_x, q x \hat{x}}, \quad (6.52)$$

$$\mathbf{J}_{L,z,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,q,f}^+ \mathbf{J}_{L,z,q,f}^+ \sin(k_0 v_f^+ (z + (D_1 - d_1))) + C_{L,q,f}^- \mathbf{J}_{L,z,q,f}^- \sin(k_0 v_f^- (z - D_1)) \right] e^{ik_x, q x \hat{z}}. \quad (6.53)$$

Vztahy (6.52) a (6.53) se vztahují k popisu silné provázanosti nelokálních polí, pro případ přibližného řešení lze využít relace (6.25) a (6.26) a k nim adekvátní předpisy pro longitudinální elektrické pole. Longitudinální pole nemá magnetickou komponentu pole, a tak stačí definovat obecnou podobu komponent elektrického pole. V analogii s (6.52) a (6.53) plyne:

$$\mathbf{E}_{L,x,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,f}^+ \mathbf{E}_{L,x,q,f}^+ \cos(k_0 v_f^+ (z + (D_1 - d_1))) + C_{L,f}^- \mathbf{E}_{L,x,q,f}^- \cos(k_0 v_f^- (z - D_1)) \right] e^{ik_x, q x \hat{x}}, \quad (6.54)$$

$$\mathbf{E}_{L,z,q,f}(\mathbf{r}, \omega) = \left[C_{L,f}^+ \mathbf{E}_{L,z,q,f}^+ \sin(k_0 v_f^+ (z + (D_1 - d_1))) + C_{L,f}^- \mathbf{E}_{L,z,q,f}^- \sin(k_0 v_f^- (z - D_1)) \right] e^{ik_x, q x \hat{z}}. \quad (6.55)$$

Nyní představuje zásadní otázku samotné určení amplitud polí jednotlivých vázaných vln. Magnetické pole je plně určeno vztahy (6.16) a (6.21) porovnáním s (6.47), zjistíme, že $\mathbf{H}_{T,y,q,f}^+ = W_{q,f}$ a stejně tak $\mathbf{H}_{T,y,q,f}^- = W_{q,f}$. Ze znalosti magnetického pole a jeho amplitud je možné určit amplitudy transverzálního elektrického pole a to dle Maxwellovy rovnice (6.3) a vlastnosti nulové divergence, platí tedy:

$$\nabla \times \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = i\omega\mu_0\mathbf{H}_T(\mathbf{r}, \omega), \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_T(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (6.56)$$

Za předpokladu transverzálně magnetického pole jsou nenulové pouze složky: $\mathbf{E}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{E}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega)$ a Maxwellovu rovnici v (6.56) je možné uvést v následující podobě:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{E}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathbf{E}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial z} - \frac{\partial \mathbf{E}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial x} \\ -\frac{\partial \mathbf{E}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i\omega\mu_0\mathbf{H}_y(\mathbf{r}, \omega) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.57)$$

Vzhledem k tomu, že se i v kovovém elementu šíří pole v rovině dopadu dopadající vlny, je y -nová složka k_y vlnového vektoru \mathbf{k} nulová a tudíž $\partial \mathbf{E}_{T,x}(\mathbf{r}, \omega)/\partial y$ i $\partial \mathbf{E}_{T,z}(\mathbf{r}, \omega)/\partial y$ jsou taktéž nulové. Snadno se lze přesvědčit, že obě rovnice v (6.56), lze převést na vztahy mezi amplitudami polí transverzálního pole, odděleně dle směru šíření označené horními indexy $+$ a $-$ v podobě vztahů:

$$\begin{pmatrix} k_0\vartheta_f & -k_{x,q} \\ k_{x,q} & k_0\vartheta_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{T,x,q,f}^+ \\ \mathbf{E}_{T,z,q,f}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega\mu_0\mathbf{H}_{y,q,f}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} -k_0\vartheta_f & -k_{x,q} \\ k_{x,q} & -k_0\vartheta_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{T,x,q,f}^- \\ \mathbf{E}_{T,z,q,f}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega\mu_0\mathbf{H}_{y,q,f}^- \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.58)$$

Výchozími relacemi pro určení amplitud jednotlivých vázaných vln longitudinálního pole jsou předpisy pro prostorové harmoniky (6.45) a (6.46), jejich porovnáním s (6.52) respektive s (6.53) lze získat:

$$\mathbf{J}_{L,z,q,f}^+ = -\sum_r S_{q-r}k_0v_f^+w_{r,f}^+, \quad \mathbf{J}_{L,z,q,f}^- = -\sum_r S_{q-r}k_0v_f^-w_{r,f}^-, \quad (6.59)$$

$$\mathbf{J}_{L,x,q,f}^+ = \sum_r iS_{q-r}k_{x,r}w_{r,f}^+, \quad \mathbf{J}_{L,x,q,f}^- = \sum_r iS_{q-r}k_{x,r}w_{r,f}^-. \quad (6.60)$$

Zbývá určit amplitudy složek transverzální proudové hustoty $\mathbf{J}_{T,x,q,f}^+$, $\mathbf{J}_{T,z,q,f}^+$, $\mathbf{J}_{T,x,q,f}^-$, $\mathbf{J}_{T,z,q,f}^-$ a amplitudy elektrického pole longitudinálních vázaných vln $\mathbf{E}_{L,x,q,f}^+$, $\mathbf{E}_{L,z,q,f}^+$, $\mathbf{E}_{L,x,q,f}^-$, $\mathbf{E}_{L,z,q,f}^-$. V případě prvně zmíněných veličin transverzálního pole je zásadní vztah (6.7), jde-li o longitudinální pole, pak je klíčová rovnice (6.23). Použijeme-li úsporné značení v podobě symbolu \pm tak, že je zachováno pořadí a smysl znamének, pak lze zjistit hodnoty dosud neurčených amplitud níže uvedenými relacemi:

$$\mathbf{E}_{T,x,q,f}^\pm = \pm \frac{\omega\mu_0\vartheta_f}{k_{x,q}^2 + \vartheta_f^2} \mathbf{H}_{y,q,f}^\pm, \quad \mathbf{E}_{T,z,q,f}^\pm = \pm \frac{\omega\mu_0k_{x,q}}{k_{x,q}^2 + \vartheta_f^2} \mathbf{H}_{y,q,f}^\pm. \quad (6.61)$$

$$\mathbf{J}_{T,x,q,f}^\pm = \frac{i\varepsilon_0\omega_p^2}{(\omega + i\gamma)} \mathbf{E}_{T,x,q,f}^\pm, \quad \mathbf{J}_{T,z,q,f}^\pm = \frac{i\varepsilon_0\omega_p^2}{(\omega + i\gamma)} \mathbf{E}_{T,z,q,f}^\pm. \quad (6.62)$$

$$\mathbf{E}_{L,x,q}^\pm = (i\omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega))^{-1} \mathbf{J}_{L,x,q,f}^\pm, \quad \mathbf{E}_{L,z,q}^\pm = (i\omega\varepsilon_0\varepsilon_b(\omega))^{-1} \mathbf{J}_{L,z,q,f}^\pm. \quad (6.63)$$

Na základě znalosti amplitud polí, náležitých jednotlivým vázaným vlnám, je možné stanovit konkrétní podobu okrajových podmínek a ty vyřešit prostřednictvím z nich odvozené rozptylové S-matice. Podrobný popis konstrukce nelokální S-matice pro vybraný typ okrajových podmínek bude náplní následující části této kapitoly.

Rozptylová matice

Zásadní součástí simulačních metod je vyřešení otázky okrajových podmínek. Existuje několik přístupů, zde se však zaměříme na, pro metodu RCWA nejběžnější, spočívající ve využití rozptylové S-maticy. Zabývali jsme se úlohou na vlastní čísla, viz článek [109], kde jsou nelokální elementy mřížky od sebe odděleny dielektrickými elementy. V této části se budu zabývat i obecnějším případem, kdy mohou nelokální elementy se sebou sousedit.

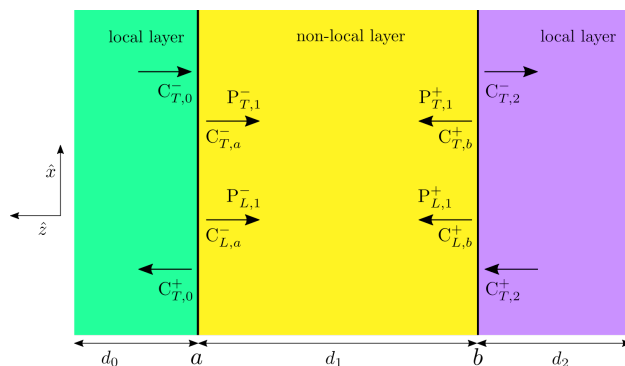
S-maticový algoritmus v sobě zahrnuje dvě stěžejní otázky, první z nich je konkrétní podoba rozptylové matice, jež je nutně specifická pro rozhraní různých typů. Druhá otázka, nedílně související s první, se týká algoritmu řešení okrajových podmínek pro vícevrstvé systémy struktur, kterou není nutné se zabývat, v případě omezení prováděné analýzy na jedinou vrstvu či binární difrakční mřížku.

V dalším se zaměříme na S-matici nejjednoduššího typu odpovídající „hard wall“ okrajovým podmínkám na obou rozhraních nelokálního segmentu, tj., že hodnoty veličiny na okraji zůstanou konstantní a neměnné průběhu řešení. Pro budoucí výzkum je zvládnutí techniky konstrukce S-matic stěžejní a z tohoto pohledu je přínosné uvést podrobný rozbor odvození S-maticy. Obdobným postupem lze totiž odvodit rozptylové matice pro ostatní varianty rozhraní a kombinace okrajových podmínek.

Na úvod je potřeba zmínit, že existuje celá řada možností zavedení značení, od čehož se bude odvíjet i výsledná podoba S-maticy. Tato značení je nutné upravit pro naše účely, a to pomocí transformačních vztahů, které lze snadno odvodit. Díky tomu lze provést převod mezi veličinami a následně S-maticemi.

Jev rozptylu nelokálního elementu znázorňuje obrázek 6.3, rozhraní dielektrika a kovu, ve schématu nalevo, o souřadnici $z = a$ náleží vrchnímu rozhraní daného úseku mřížky a rozhraní kov-dielektrikum mající souřadnici $z = b$ je jejím spodním rozhraním. Mřížkový vektor má orientaci rovnoběžnou s osou \hat{x} .

Než bude objasněn význam nově zavedených symbolů, je potřeba zmínit, že zamýšlené odvození S-maticy se vztahuje ke konkrétně zadaným indexům q a f rozkladových vln a k tomu příslušných veličin; kvůli potřebě úspornosti zápisu nebudou těmito indexy specifikovány.



Obrázek 6.3: Schema mechanismu rozptylu nelokálního prostředí.

Interakce zpodobněná obrázkem 6.3 je následující, do elementu vstupují z vrchního a spodního rozhraní vlny o koeficientech rozvoje $C_{T,0}^-$ respektive $C_{T,2}^+$, následkem procesu

rozptylu pak z horního rozhraní vychází vlna o koeficientu $C_{T,0}^+$ a ze spodního o rozhraní o koeficientu $C_{T,2}^-$. Uvnitř nelokálního elementu na vnitřní části ohraničení v $z = a$ existuje jak transverzální tak longitudinální pole směřující ke spodnímu okraji s koeficienty $C_{T,a}^-$ a $C_{L,a}^-$. Obdobně poli na spodním okraji elementu z jeho vnitřní strany v $z = b$ lze přisoudit koeficienty $C_{T,b}^+$ a $C_{L,b}^+$ a dle šipek opačný směr šíření, tedy k vrchnímu okraji. Změna fáze vztahující se k uražené vzdálenosti mezi rozhraními má pro transverzální pole a kladný směr šíření podél osy \hat{z} hodnotu $P_{T,1}^+ = e^{ik_0\vartheta_f d_1}$ a pro vlnu šířící se opačným směrem $P_{T,1}^- = e^{-ik_0\vartheta_f d_1}$. Jde-li o longitudinální pole a aproximativní řešení pak $P_{L,1}^+ = e^{ik_0v_q d_1}$ a $P_{L,1}^- = e^{-ik_0v_q d_1}$. Pokud je předpokládána vysoká provázanost longitudinálních polí, pak je nutné využít vztahy (6.52) až (6.55), čemuž odpovídá i tvar fázových členů:

$$P_{L,1}^+ = \frac{\cos(k_0v_f^+ D_1)}{\cos(k_0v_f^+(D_1 - d_1))}, \quad P_{L,1}^- = \frac{\cos(k_0v_f^-(D_1 - d_1))}{\cos(k_0v_f^- D_1)}. \quad (6.64)$$

Prvním krokem, s ohledem na zavedené značení a schéma na obr. 6.3, je zformulování konkrétních vztahů okrajových podmínek pro obě rozhraní na pozicích $z = a$ a $z = b$ a z nich následné odvození příslušných rozptylových matic $S^{(1)}$ a $S^{(2)}$ náležící zmíněným ohraničením segmentu. Znalost těchto „okrajových“ S-matic $S^{(1)}$ a $S^{(2)}$ lze pak využít pro zkonstruování hledané rozptylové S-matice nelokálního elementu difrakční vrstvy (mřížky).

Vyjádření spojitosti tečné (x-ové) složky elektrického pole na okraji segmentu v $z = a$ za předpokladu, že levá strana rovnice odpovídá elektrickému poli na levém poloprostoru rozhraní a pravá strana rovnice poli na pravé části rozhraní, má tvar:

$$C_{T,0}^- E_{T,x,0}^- + C_{T,0}^+ E_{T,x,0}^+ = C_{T,a}^- E_{T,x,a}^- + C_{L,a}^- E_{L,x,a}^- + C_{T,b}^+ P_{T,1}^+ E_{T,x,b}^+ + C_{L,b}^+ P_{L,1}^+ E_{L,x,b}^+. \quad (6.65)$$

Nyní se zabýváme další okrajovou podmínkou, přičemž využijme faktu, že longitudinální pole má nulový vektor magnetické intenzity. Prostou náhradou amplitud x-ové komponenty transverzálního elektrického pole $E_{T,x,0}^-, E_{T,x,0}^+, E_{T,x,a}^-, E_{T,x,b}^+$ za amplitudy magnetického pole téže vlny rozkladu, $H_{T,y,0}^-, H_{T,y,0}^+, H_{T,y,a}^-, H_{T,y,b}^+$, lze jednoduše dostat z (6.65) okrajovou podmínku spojitosti tečné (y-ové) složky celkového magnetického pole na prvním rozhraní ($x = a$) v následující podobě:

$$C_{T,0}^- H_{T,y,0}^- + C_{T,0}^+ H_{T,y,0}^+ = C_{T,a}^- H_{T,y,a}^- + C_{T,b}^+ P_{T,1}^+ H_{T,y,b}^+. \quad (6.66)$$

Obdobný přístup je možné zvolit pro stanovení takzvané „hard wall“ podmínky pro normálovou složku proudové hustoty k rozhraní. Do dielektrického prostředí nemůže proudová vlna vstupovat, to odpovídá nulové levé straně rovnice. Záměnou příslušných amplitud elektrických polí vázaných vln rozvoje v (6.65) za amplitudy proudových hustot jednoduše obdržíme:

$$0 = C_{T,a}^- J_{T,z,a}^- + C_{L,a}^- J_{L,z,a}^- + C_{T,b}^+ P_{T,1}^+ J_{T,z,b}^+ + C_{L,b}^+ P_{L,1}^+ q_{L,1}^+ J_{L,z,b}^+. \quad (6.67)$$

Okrajová podmínka (6.67) obsahuje nově zavedený člen $q_{L,1}^+$, modifikující amplitudu vlny proudové hustoty $J_{L,z,b}^+$ tak, aby byl možný jednotný maticový zápis podmínek jak pro přesné, tak pro aproximativní řešení slabé provázanosti longitudinálních polí. Je-li uvažována varianta slabé provázanosti, pak $q_{L,1}^+ = 1$, v druhém případě silné vazby mezi longitudinálními vlnami má modifikační člen hodnotu:

$$q_{L,1}^+ = \frac{\sin(k_0v_f^+ D_1)}{\sin(k_0v_f^+(D_1 - d_1))} \cdot \frac{\cos(k_0v_f^+(D_1 - d_1))}{\cos(k_0v_f^+ D_1)} = \frac{\tan(k_0v_f^+ D_1) \cot(k_0v_f^+(D_1 - d_1))}{\tan(k_0v_f^+ D_1) \cot(k_0v_f^+(D_1 - d_1))}. \quad (6.68)$$

V dalším je potřeba pracovat s maticovými formami vztahů, rovnice (6.65), (6.66) a (6.67) lze jednoduše uvést v následující podobě:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,0}^- & E_{T,x,0}^+ \\ H_{T,y,0}^- & H_{T,y,0}^+ \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^- \\ C_{T,0}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- & E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ \\ H_{T,y,a}^- & 0 & H_{T,y,b}^+ & 0 \\ J_{T,z,a}^- & J_{L,z,a}^- & J_{T,z,b}^+ & q_{L,1}^+ J_{L,z,b}^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ P_{T,1}^+ C_{T,b}^+ \\ P_{L,1}^+ C_{L,b}^+ \end{bmatrix}. \quad (6.69)$$

Převodem druhého sloupce matice na levé straně (6.69) na pozici třetího sloupce matice na pravé straně a adekvátně k tomu ubráním a doplněním vektoru neznámých dostaneme:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,0}^- \\ H_{T,y,0}^- \\ 0 \end{bmatrix} C_{T,0}^- = \begin{bmatrix} E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- & -E_{T,x,0}^+ & E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ \\ H_{T,y,a}^- & 0 & -H_{T,y,1}^+ & H_{T,y,b}^+ & 0 \\ J_{T,z,a}^- & J_{L,z,a}^- & 0 & J_{T,z,b}^+ & q_{L,1}^+ J_{L,z,b}^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ C_{T,0}^+ \\ P_{T,1}^+ C_{T,b}^+ \\ P_{L,1}^+ C_{L,b}^+ \end{bmatrix}. \quad (6.70)$$

Pro další postup je nyní vhodné definovat rozptylovou matici prvního rozhraní v $z = a$. Koeficienty rozvoje vln z rozhraní vycházejících jsou vyjádřeny jako jistá lineární kombinace koeficientů rozvoje do rozhraní vstupujících, následovně:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & S_{12}^{(1)} & S_{13}^{(1)} \\ S_{21}^{(1)} & S_{22}^{(1)} & S_{23}^{(1)} \\ S_{31}^{(1)} & S_{32}^{(1)} & S_{33}^{(1)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^- \\ P_{T,1}^+ C_{T,b}^+ \\ P_{L,1}^+ C_{L,b}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ C_{T,0}^+ \end{bmatrix}. \quad (6.71)$$

Definiční relace (6.71) nám přímo napovídá, jaké úpravy je potřeba učinit k převodu vztahu (6.70) do požadované podoby (6.71). Přesunutím posledních dvou sloupců matice na pravé straně rovnice (6.70) na levou stranu a příslušnou změnou vektorů neznámých jednoduše získáme:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,0}^- & -E_{T,x,b}^+ & -E_{L,x,b}^+ \\ H_{T,y,0}^- & -H_{T,y,b}^+ & 0 \\ 0 & -J_{T,z,b}^+ & -q_{L,1}^+ J_{L,z,b}^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^- \\ P_{T,1}^+ C_{T,b}^+ \\ P_{L,1}^+ C_{L,b}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- & -E_{T,x,0}^+ \\ H_{T,y,a}^- & 0 & -H_{T,y,0}^+ \\ J_{T,z,a}^- & J_{L,z,a}^- & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ C_{T,0}^+ \end{bmatrix} \quad (6.72)$$

Nyní postačuje nalézt inverzní matici k té na pravé straně rovnice (6.72) a vynásobit jí celou tuto rovnici. Takto dosáhneme kýženého vyjádření pro rozptylovou matici S^1 prvního rozhraní nelokálního elementu, jakožto veličiny závislé na amplitudách vázaných vln rozvoje celkového pole, udávané relacemi (6.61), (6.62) a (6.63), v následující podobě:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & S_{12}^{(1)} & S_{13}^{(1)} \\ S_{21}^{(1)} & S_{22}^{(1)} & S_{23}^{(1)} \\ S_{31}^{(1)} & S_{32}^{(1)} & S_{33}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- & -E_{T,x,0}^+ \\ H_{T,y,a}^- & 0 & -H_{T,y,0}^+ \\ J_{T,z,a}^- & J_{L,z,a}^- & 0 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} E_{T,x,0}^- & -E_{T,x,b}^+ & -E_{L,x,b}^+ \\ H_{T,y,0}^- & -H_{T,y,b}^+ & 0 \\ 0 & -J_{T,z,b}^+ & -q_{L,1}^+ J_{L,z,b}^+ \end{bmatrix} \quad (6.73)$$

Dosavadní rozbor se týkal stanovení okrajových podmínek a z nich odvozené rozptylové matice $S^{(1)}$ prvního rozhraní nelokálního segmentu mřížky $z = a$, pro odvození S-matice celého elementu je nutná znalost obdobné rozptylové matice $S^{(2)}$ druhého rozhraní dle obr. 6.3 v $z = b$. V analogii s předchozím postupem zformulujeme okrajovou podmínku spojitosti tečné (x-ové) složky elektrického pole na druhém rozhraní nelokálního segmentu, kvůli přehlednosti, necht' levá strana rovnice zahrnuje pole vln na rozhraní z levé strany a pravá strana pole přisouzené vlnám na rozhraní z pravé strany, takto obdržíme:

$$\begin{aligned} C_{T,a}^- P_{T,1}^- E_{T,x,a}^- + C_{L,a}^- P_{L,1}^- E_{L,x,a}^- + C_{T,b}^+ E_{T,x,b}^+ + C_{L,b}^+ E_{L,x,b}^+ = \\ C_{T,2}^- E_{T,x,2}^- + C_{T,2}^+ E_{T,x,2}^+. \end{aligned} \quad (6.74)$$

Podmínku spojitosti tečné (y-ové) složky magnetického pole lze najít, obdobně jako v případě vztahu (6.66), záměnou amplitud elektrických polí transverzálních vln v (6.74) za magnetické, připomeňme, že longitudinální vlna nemá magnetickou komponentu pole, z uvedeného vyplývá:

$$C_{T,a}^- P_{T,1}^- H_{T,y,a}^- + C_{T,b}^+ H_{T,y,b}^+ = C_{T,2}^- H_{T,y,2}^- + C_{T,2}^+ H_{T,y,2}^+. \quad (6.75)$$

Okrajovou podmínku pro proudovou hustotu lze dostat opět pouhou záměnou jednotlivých amplitud elektrického pole na levé straně rovnice (6.74) za odpovídající amplitudy normálové (z-ové) složky proudové hustoty k druhému rozhraní, jež je dle obr. 6.3 spoluutvářeno zprava dielektrikem, v němž je proudová hustota nulová a tedy platí:

$$C_{T,a}^- P_{T,1}^- J_{T,z,a}^- + C_{L,a}^- P_{L,1}^- q_{L,1}^- J_{L,z,a}^- + C_{T,b}^+ J_{T,z,b}^+ + C_{L,b}^+ J_{L,z,b}^+ = 0. \quad (6.76)$$

Opět jako v případě okrajové podmínky (6.67) je z důvodu jednotného maticového zápisu všech okrajových podmínek pro obě varianty aproximativního i přesného řešení zapotřebí zavést v (6.76) modifikační člen $q_{L,1}^-$ pro amplitudu $J_{L,z,a}^-$. Za předpokladu slabé provázanosti longitudinálních vln je $q_{L,1}^-$ rovno jedné, naopak pro potřeby přesného řešení lze pro modifikační člen odvodit tvar:

$$q_{L,1}^- = \frac{\sin(k_0 v_f^- (D_1 - d_1))}{\sin(k_0 v_f^- D_1)} \cdot \frac{\cos(k_0 v_f^- D_1)}{\cos(k_0 v_f^- (D_1 - d_1))} = \tan(k_0 v_f^- (D_1 - d_1)) \cot(k_0 v_f^- D_1). \quad (6.77)$$

Aby bylo zamezeno singularitě námi definovaného modifikačního členu $q_{L,1}^-$, je nutné zadat nenulovou hodnotu souřadnice D_1 horního rozhraní mřížky (vrstvy o $l = 1$ viz obr. 6.1) na ose \hat{z} . Podmínky (6.74), (6.75) a (6.76) lze po prohození jejich pravých a levých stran, a při ponechání modifikačního členu $q_{L,1}^-$ před amplitudou $J_{L,z,a}^-$, zapsat v následující maticové podobě:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,2}^- & E_{T,x,2}^+ \\ H_{T,y,2}^- & H_{T,y,2}^+ \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,2}^- \\ C_{T,2}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ & E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- \\ H_{T,y,b}^+ & 0 & H_{T,y,a}^- & 0 \\ J_{T,z,b}^+ & J_{L,z,b}^+ & J_{T,z,a}^- & q_{L,1}^- J_{L,z,a}^- \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ P_{T,1}^- C_{T,a}^- \\ P_{L,1}^- C_{L,a}^- \end{bmatrix}. \quad (6.78)$$

Převodem prvního sloupce matice na levé straně rovnice (6.78) na pozici třetího sloupce matice na pravé straně vztahu a souběžně s tím náležitě rozšíření a zkrácení vektorů neznámých o jednu komponentu dostaneme:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,2}^+ \\ H_{T,y,2}^+ \\ 0 \end{bmatrix} C_{T,2}^+ = \begin{bmatrix} E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ & -E_{T,x,2}^- & E_{T,x,a}^- & E_{L,x,a}^- \\ H_{T,y,b}^+ & 0 & -H_{T,y,2}^- & H_{T,y,a}^- & 0 \\ J_{T,z,b}^+ & J_{L,z,b}^+ & 0 & J_{T,z,a}^- & q_{L,1}^- J_{L,z,a}^- \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,2}^- \\ P_{T,1}^- C_{T,a}^- \\ P_{L,1}^- C_{L,a}^- \end{bmatrix}. \quad (6.79)$$

Z hlediska názornosti je pro další postup výhodné, podobně jako v případě prvního rozhraní a výrazu (6.71), uvést obecnou formu rozptylové matice $S^{(2)}$ druhého rozhraní, následovně:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(2)} & S_{12}^{(2)} & S_{13}^{(2)} \\ S_{21}^{(2)} & S_{22}^{(2)} & S_{23}^{(2)} \\ S_{31}^{(2)} & S_{32}^{(2)} & S_{33}^{(2)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,2}^+ \\ P_{T,1}^- C_{T,a}^- \\ P_{L,1}^- C_{L,a}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,2}^- \end{bmatrix}. \quad (6.80)$$

Pohled na definiční předpis (6.80) nám ozřejmí, jaké algebraické úpravy je zapotřebí postupně s rovnicí (6.79) provést. Převedením posledních dvou sloupců matice na pravé straně rovnice (6.79) na její levou stranu na pozici druhého a třetího sloupce nově vytvořené matice a současně s tím odpovídajícím způsobem rozšířením respektive zkrácením vektorů neznámých dostaneme:

$$\begin{bmatrix} E_{T,x,2}^+ & -E_{T,x,a}^- & -E_{L,x,a}^- \\ H_{T,y,2}^+ & -H_{T,y,a}^- & 0 \\ 0 & -J_{T,z,a}^- & -q_{L,1}^- J_{L,z,a}^- \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,2}^+ \\ P_{T,1}^- C_{T,a}^- \\ P_{L,1}^- C_{L,a}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ & -E_{T,x,2}^- \\ H_{T,y,b}^+ & 0 & -H_{T,y,2}^- \\ J_{T,z,b}^+ & J_{L,z,b}^+ & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,2}^- \end{bmatrix} \quad (6.81)$$

Následný postup je zřejmý, stačí nalézt inverzní matici k té na levé straně rovnice (6.81) a tou poté vynásobit zleva zmíněnou rovnici (6.81), takto získáme požadovaný vztah pro rozptylovou matici $S^{(2)}$ druhého rozhraní:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(2)} & S_{12}^{(2)} & S_{13}^{(2)} \\ S_{21}^{(2)} & S_{22}^{(2)} & S_{23}^{(2)} \\ S_{31}^{(2)} & S_{32}^{(2)} & S_{33}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{T,x,b}^+ & E_{L,x,b}^+ & -E_{T,x,2}^- \\ H_{T,y,b}^+ & 0 & -H_{T,y,2}^- \\ J_{T,z,b}^+ & J_{L,z,b}^+ & 0 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} E_{T,x,2}^+ & -E_{T,x,a}^- & -E_{L,x,a}^- \\ H_{T,y,2}^+ & -H_{T,y,a}^- & 0 \\ 0 & -J_{T,z,a}^- & -q_{L,1}^- J_{L,z,a}^- \end{bmatrix} \quad (6.82)$$

Maticové formy (6.73) a (6.82) vyjadřují konkrétní předpisy pro jednotlivé členy rozptylových matic $S^{(1)}$ a $S^{(2)}$ obou rozhraní, jež funkčně závisejí na amplitudách polí (6.61), (6.62) a (6.63) vázaných vln a tedy na hodnotách příslušných vlastních čísel a komponentách vlastních vektorů. Z hlediska dalšího postupu není zapotřebí znát explicitní podobu rozptylových matic, pro všechny další kroky je postačující znalost definičních vztahů (6.71) a (6.80), zohledňujících zvolené schéma rozptylu nelokálního elementu, v našem případě dle obr. 6.3.

Nelokální segment difrakční mřížky má z pohledu uvažovaného rozptylového procesu dvě vstupní transverzální vlny o koeficientech $C_{T,0}^-$ a $C_{T,2}^+$ na jeho dvou rozhraních v $z = a$ a $z = b$, všechny ostatní koeficienty rozvoje celkového pole jsou odvislé od zmíněných hodnot $C_{T,0}^-$ a $C_{T,2}^+$ a hledané S-matice nelokálního elementu. Jako smysluplný krok se tedy jeví vyjádření $C_{T,0}^-$ ze vztahu (6.71) a podobně $C_{T,2}^+$ z (6.80). Začneme prvním bodem, vektor na pravé straně rovnice (6.71) lze chápat jako součin jednotkové matice (identity) a tohoto vektoru, převedením jej na levou stranu obdržíme:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & S_{12}^{(1)} & S_{13}^{(1)} & -1 & 0 & 0 \\ S_{21}^{(1)} & S_{22}^{(1)} & S_{23}^{(1)} & 0 & -1 & 0 \\ S_{31}^{(1)} & S_{32}^{(1)} & S_{33}^{(1)} & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^- \\ P_{T,1}^+ C_{T,b}^+ \\ P_{L,1}^+ C_{L,b}^+ \\ C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ C_{T,0}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6.83)$$

Dále pokračujeme v úpravách rovnice (6.83), přiřazením fázových členů $P_{T,1}^+$, $P_{L,1}^+$, k příslušným maticovým komponentám, převodem jejího prvního sloupce na pravou stranu rovnice, následně přesunutím posledního sloupce matice na první pozici a nakonec vynásobením celého vztahu (-1) , získáme:

$$\begin{bmatrix} 0 & -S_{12}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{13}^{(1)} P_{L,1}^+ & 1 & 0 \\ 0 & -S_{22}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{23}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 1 \\ 1 & -S_{32}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{33}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^+ \\ C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \end{bmatrix} = C_{T,0}^- \begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} \\ S_{21}^{(1)} \\ S_{31}^{(1)} \end{bmatrix}. \quad (6.84)$$

Obdobně, jako byl transformován definiční vztah (6.71) do podoby (6.84), je zapotřebí převést i relaci (6.80) do nového tvaru. Záměrem je, aby koeficient $C_{T,2}^+$ byl zahrnut na

pravé straně rovnice a současně, aby uspořádání zbylých koeficientů ve vektoru na levé straně rovnice odpovídalo až na jeden tomu, jaké je v (6.84). Důvodem těchto kritérií, je potřeba sloučení vztahů do jediného. Převodem pravé strany rovnice v (6.80) na levou, fázových členů $P_{T,1}^-$, $P_{L,1}^-$ k maticovým prvkům a přesunem posledního sloupce matice na pozici druhého dostaneme:

$$\begin{bmatrix} S_{11}^{(2)} & 0 & S_{12}^{(2)} P_{T,1}^- & S_{13}^{(2)} P_{L,1}^- & -1 & 0 \\ S_{21}^{(2)} & 0 & S_{22}^{(2)} P_{T,1}^- & S_{23}^{(2)} P_{L,1}^- & 0 & -1 \\ S_{31}^{(2)} & -1 & S_{32}^{(2)} P_{T,1}^- & S_{33}^{(2)} P_{L,1}^- & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,2}^+ \\ C_{T,2}^- \\ C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \\ C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6.85)$$

Převodem prvního sloupce matice ve výrazu (6.85) na pravou stranu rovnice, následně vynásobením celého vztahu (-1) a postupným přeuspořádáním pozic sloupců matice a patřičně k tomu koeficientů rozvoje ve vektoru neznámých, dosáhneme vyjádření:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -S_{12}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{13}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 0 & 0 & 1 & -S_{22}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{23}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 1 & 0 & 0 & -S_{32}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{33}^{(2)} P_{L,1}^- \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,2}^- \\ C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \end{bmatrix} = C_{T,2}^+ \begin{bmatrix} S_{11}^{(2)} \\ S_{21}^{(2)} \\ S_{31}^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (6.86)$$

Nyní se dostáváme k samotnému procesu sloučení výrazů (6.84) a (6.86) a tím odvození jednotné maticové formy zápisu všech rozebíraných vztahů. Nejprve je nutné rozšířit obě matice (6.84) i (6.86) o jeden sloupec s nulovými prvky (konkrétně v (6.84) na první a v (6.86) na druhou pozici), což umožní uvést vektory neznámých koeficientů na pravé straně rovnic na stejný tvar. Takto upravené vztahy (6.84) a (6.86) lze již snadno souhrnně vyjádřit v následující podobě:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -S_{12}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{13}^{(1)} P_{L,1}^+ & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -S_{22}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{23}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -S_{32}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{33}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -S_{12}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{13}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -S_{22}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{23}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -S_{32}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{33}^{(2)} P_{L,1}^- \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^+ \\ C_{T,2}^- \\ C_{T,b}^+ \\ C_{L,b}^+ \\ C_{T,a}^- \\ C_{L,a}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & 0 \\ S_{21}^{(1)} & 0 \\ S_{31}^{(1)} & 0 \\ 0 & S_{11}^{(2)} \\ 0 & S_{21}^{(2)} \\ 0 & S_{31}^{(2)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{T,0}^- \\ C_{T,2}^+ \end{bmatrix}$$

Pomocí inverzní matice pravé strany posledně uvedeného vztahu lze získat finální předpis pro nelokální S-matici kovového segmentu difrakční mřížky v níže uvedeném tvaru:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -S_{12}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{13}^{(1)} P_{L,1}^+ & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -S_{22}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{23}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -S_{32}^{(1)} P_{T,1}^+ & -S_{33}^{(1)} P_{L,1}^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -S_{12}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{13}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -S_{22}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{23}^{(2)} P_{L,1}^- \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -S_{32}^{(2)} P_{T,1}^- & -S_{33}^{(2)} P_{L,1}^- \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & 0 \\ S_{21}^{(1)} & 0 \\ S_{31}^{(1)} & 0 \\ 0 & S_{11}^{(2)} \\ 0 & S_{21}^{(2)} \\ 0 & S_{31}^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (6.87)$$

Tímto jsme dospěli ke konečnému tvaru nelokální S-matice pro nelokální kovový element, jenž je součástí periodické mřížky obklopené dielektrickými vrstvami. Ze vztahu (6.87) je zřejmé, že koeficienty rozvoje longitudinálního pole $C_{L,b}^+ \equiv C_{L,b,q,f}^+$ a $C_{L,a}^- \equiv C_{L,a,q,f}^-$, ve zde použitým úsporném značení nejsou indexy q a f uváděny, nemohou mít pro zadané f

shodnou hodnotu s koeficienty o témže f a jiném q . Znamenalo by to totiž, že jedinými proměnnými vystupující v (6.87) jsou $C_{T,0}^-$ a $C_{T,2}^+$. Ze zmíněného vyplývá, že s ohledem na proměnnou hodnotu prvků S-matice vzhledem k indexu q , by rovnice (6.87) neměla řešení, neboť by počet rovnic převyšoval počet neznámých. Sníženou hodnotu matice na levé straně (6.87) není obecně možné předpokládat. Korektní přesné řešení interakce spočívá v nalezení transversálních i longitudinálních vlastních čísel a vektorů společně s určením všech koeficientů rozvoje polí. Všechny vyjmenované veličiny musí souběžně splňovat rovnice (6.22),(6.43),(6.44) a (6.87). Jinak řečeno, vlastní čísla i vektory longitudinálního pole jsou implicitně i explicitně funkčně závislá na koeficientech rozvoje. Vztah (6.87) je tak záhodno, pro zvolené f , zapsat ve formě nelineární soustavy rovnic:

$$\mathbf{S}_f(v_f^+(\bar{C}_{q,f}), v_f^-(\bar{C}_{q,f}), w_{q,f}^+(\bar{C}_{q,f}), w_{q,f}^-(\bar{C}_{q,f})) \cdot \bar{C}_{T,in} - \bar{C}_{q,f} = 0. \quad (6.88)$$

Vektoru koeficientů rozvoje polí, na levé straně rovnice (6.87), odpovídá v (6.88) symbol $\bar{C}_{q,f}$ a koeficienty $C_{T,0}^-$ a $C_{T,2}^+$, do nelokálního elementu vstupujících polí, reprezentuje vektor $\bar{C}_{T,in}$.

Prozatímni výzkum zobecnění Fourierovské modální metody na nelokální variantu 1D periodické binární mřížky lze shrnout závěrem, že se pro potřeby popisu interakce bez aproximací, se z matematického hlediska, jedná o systém vzájemně provázaných nelineárních rovnic. Samotná úloha se tak stává značně komplexní záležitostí, jejíž úspěšná implementace, po numerické stránce, bude v příslušném softwarovém matematickém prostředí vyžadovat nemalé úsilí.

Souvisejícím tématem je též otázka násobení S-matic a tomu odpovídající kaskádní algoritmus, nicméně touto záležitostí je relevantní se zabývat až po zvládnutí zde nastíněného nejjednoduššího možného problému interakce a to periodické mřížky v izolované planární vrstvě.

Závěr

Jedním z hlavních cílů této disertační práce bylo vytvoření modelů popisujících plazmonickou nelokální interakci, jejich klasifikace a především z matematického hlediska stanovení možných cest, jak tyto modely řešit. Nelokální interakce se stává poměrně významným tématem pro obor plazmoniky, čemuž odpovídá rychle narůstající objem nových vědeckých článků a prací zaměřených na toto téma. Velká část těchto publikací se zabývá hydrodynamickým modelem a jeho řešením, neboť se jedná o preferovanou variantu popisu umožňující zohlednit i nelokální procesy probíhající při interakci plazmonické struktury s EM polem. Bohužel však ne všechny publikace z této oblasti výzkumu nabízejí srozumitelnou a konzistentní formu a detailnost odvozovaných postupů řešení jednotlivých problémů. V řadě článků lze nalézt složité matematické konstrukce využívající aparát zobecněných funkcí, integro-diferenciálních rovnic, či jsou rovnice modelu přetransformovány do Fourierova prostoru vlnových čísel. Takovéto přístupy však mohou přinést celou řadu nových obtíží například při formulaci okrajových podmínek pro nově předefinované úlohy, nehledě na následnou složitost hledání numerického řešení.

Z výše uvedených důvodů byla velká část této práce věnována právě HD modelu, jeho možným zobecněním a především jeho využití k popisu interakce EM pole s jednoduchými plazmonickými strukturami. V této práci byly uvedeny konkrétní postupy a analytická řešení HD modelu pro kovovou sférickou částici, rovinnou vrstvu, rovinnou dvojrstvu a též systém takovýchto dielektricko-metalických vrstev. Jeden z možných přínosů této práce by mohly být právě uváděné návody a podrobněji okomentované matematické úpravy, které vycházejí z klasických formulací a některých základních poznatků operátorové algebry. To umožňuje posoudit správnost výsledků a také některé postupy mohou být jistou inspirací při snaze se pouštět do složitějších výpočtů a popisů komplexnějších problémů. V této práci byly též naznačeny některé nesrovnalosti, na které lze narazit při aplikaci HD modelu, jde především o disperzní vztah pro vlnový vektor transverzálně elektrického pole v kovu. Okrajově se zmíněného problému dotýká velmi málo článků, přitom se jedná o zásadní otázku, která by zasluhovala širší diskuzi ve vědecké obci.

V této práci byla odvozena Lindhardova teorie, což bylo obtížné, jelikož je velice těžko dohledatelné odvození teorie v literatuře. Do značné míry bylo tak nutno některé věci odvodit vlastní cestou, aby se jednalo o matematicky korektní odvození. Toto vnímám jako jeden z přínosů práce, a rád bych se tomu věnoval v rámci další vědecké činnosti. Teorii je dle mého názoru možné zpřesňovat jedině, pokud je zcela známo detailní odvození. V práci je stručně okomentováno, jak Lindhardovu teorii dále rozšířit. Zpřesnit by bylo možné například kvazistatické přiblížení, čemuž bych se také rád věnoval v rámci další vědecké činnosti. Dále jsem navrhl, jak počítat tunelovací pravděpodobnost v potenciálovém poli, jehož průběh neodpovídá obdélníkové bariéře. Z Lindhardova vzorce bylo vycházeno při vlastním teoretickém návrhu popisu permitivity kovu v blízkosti rozhraní nanostruktury (potřebné pro modelování spill out efektu). Existují mnohé modely založené na fenomenologickém popisu, otázkou je, do jaké míry jsou správné, pokud nejsou

dostatečně a řádně zdůvodněny. A právě proto uvádím popisy odvození v této práci do takové míry podrobné, aby s nimi mohli čtenáři této práce dále pracovat. K uvedení detailního popisu bylo vynaloženo velké úsilí.

Dále byl uveden vlastní přístup řešení HD modelu pro sférickou kovovou částici. Této problematice se v literatuře věnuje GNOR HD model, který zahrnuje difúzi elektronového plynu. Na problematiku bylo v této práci nahlíženo tak, že difúze může být způsobena jako zobecnění útlumu, a model tak zahrnuje viskozní a radiační útlum a zobecnění GNOR v prvním přiblížení. Při klasifikaci bylo poukázáno na možné další směry, jak řešit řídicí diferenciální rovnice proudové hustoty v modelu HDM.

V rámci analýzy byly nalezeny vhodné parametry, kdy dochází k největší nelokální odezvě v rozpětí hodnot indexu lomu běžných dielektrických optických prostředí. Pomocí zobecnění přenosové matice bylo nalezeno přesné řešení interakce rovinné vlny s nelokální kovovou vrstvou.

Nejprve byly definovány okrajové podmínky a následně byly i z matematického hlediska ověřeny. Poté byla odvozena nelokální přenosová matice pro kovovou dvojrstvu. V dalším kroku bylo nutné se vypořádat s komplikací útlumové konstanty. Při ověřování správnosti modelu došlo k důležitému poznatku, a to že musí být útlumové konstanty dvou HD modelů dvou kovů modifikovány. To celé bylo podpořeno fyzikálními úvahami. Fyzikální jev projevující se ve změně hodnot útlumových konstant lze očekávat právě u kovových dvojrstev o tloušťce menší, než je volná dráha elektronu v daných kovech tvořících dvojrstvu. V rámci této práce byl kladen důraz především na korektní způsob odvození úloh na vlastní čísla a na postup odvození nelokální rozptylové matice, jak pro longitudinální, tak pro transverzální pole. Jednalo se o matematické odvození s vysokou úrovní komplexity. Inspirací se stal námi publikovaný článek a v této práci je problematika analyzována do větší hloubky. Převážně je uveden případ, kdy je mřížka složena z vícero spolu sousedících nelokálních elementů. Cíle stanovené pro tuto disertační práci byly ve všech směrech splněny. Na poznatky uvedené v této práci lze navázat v dalším výzkumu.

Relevantní vědecké výstupy autora

- [1] Milan Burda, Ivan Richter, Pavel Kwiecien, Generalized nonlocal hydrodynamical model with viscous and radiative damping, to be submitted to JOSA A, 2023.
- [2] Ladislav Kalvoda, Jaroslava Jakoubková, Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Jaromír Kopeček, Fiber Optic Sensor of Ammonia Gas Using Plasmonic Extraordinary Optical Transmission, submitted to Sensors, 2023.
- [3] Milan Burda, Ivan Richter, Pavel Kwiecien, Nonlocal response of the planar metal layers, submitted to Plasmonics, 2023.
- [4] Pavel Kwiecien, Milan Burda, Ivan Richter, A nonlocal Fourier modal method for analyzing nonlocal plasmonic periodic nanostructures, Journal of the Optical Society of America B 40, 491 (2023).
- [5] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, A nonlocal Transfer matrix and Fourier modal methods for analyzing nonlocal plasmonic nanostructures, oral presentation, Photonics West, San Francisco, CA, USA, 28.2. – 2.3.2023.
- [6] Pavel Kwiecien, Lucie Marešová, Milan Burda, Ivan Richter, Ladislav Kalvoda, A resonant field enhancement in plasmonic multistep structures: theoretical assessment, oral presentation, Photonics West, San Francisco, CA, USA, 28.2. – 2.3.2023.
- [7] Pavel Kwiecien, Milan Burda, Ivan Richter, Nonlocal Fourier modal method, ECIO - European Conference on Integrated Optics, Milano, Italy, May 2022, pp. 183 -185.
- [8] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal interactions in planar metal layers, ECIO - European Conference on Integrated Optics, Milano, Italy, May 2022, pp. 186 -188.
- [9] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Analytical and numerical treatment of nonlocal nanoplasmonic resonant effects, SPIE PhotonicsWest, [11289-68] - Photonic and Phononic Properties of Engineered Nanostructures X, San Francisco, CA, USA, February 2020.
- [10] Pavel Kwiecien, Milan Burda, I. Richter, Numerical treatment of nonlocal nanoplasmonic resonant effects with periodic and aperiodic Fourier modal method, ICTON 2019 - 21st International Conference on Transparent Optical Networks and 11th Sub-Wavelength Photonics Conference SWP 2019, Angers, France, July 2019.
- [11] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal and quantum nanoplasmonic resonance effects: analytical and numerical treatment, [10921-54] oral presentation, SPIE

Photonics West, San Francisco, CA, USA, February 2019.

[12] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Analytical and numerical analysis of nonlocal and quantum nanoplasmonic resonance effects, SPIE Optics + Optoelectronics Prague, [11025-28] – Metamaterials, Prague, Czech Republic, April 2019.

[13] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal and quantum nanoplasmonic resonance effects: analytical and numerical treatment, [10824-33] oral presentation, SPIE Photonics Asia, Beijing, People's Republic of China, October 2018.

[14] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal hydrodynamical models in nanoplasmonics – analytical and numerical approaches, [10722-107] poster presentation, SPIE Optics & Photonics, San Diego, USA, August 2018.

[15] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal and quantum resonance behavior in plasmonics nanostructures: analysis and simulations, [10671-73] poster presentation, SPIE Photonics Europe, Strasbourg, France, April 2018.

[16] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal nanoplasmonic resonance phenomena, FNSPE student summer school SSCSSPM8, Nepomuk, CZ, September 2018.

[17] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Jan Fiala, Ivan Richter, Nonlocal resonances in nanoplasmonics: analysis and simulations, oral talk, paper [10227-24], SPIE Optics+Optoelectronics 2017, April 2017, Prague, Czech Republic.

[18] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Jan Fiala, Paper 49, Nonlocal plasmonic resonant interactions – theoretical studies: analytical and numerical approaches,” poster presentation, NanoQI – Nanotechnology meets quantum information 2017, July 2017, Donostia- San Sebastián, Spain.

[19] Milan Burda, P. Kwiecien, I. Richter, J. Fiala, Studies on nonlocal plasmonic resonances: analytical and numerical approaches, oral + poster presentation, Paper JTU3A.113, OSA Frontiers in Optics – Laser Sciences Conference, September 2017, Washington, DC, USA.

[20] Ivan Richter, Pavel Kwiecien, Jan Fiala, Jakub Lelek, Milan Burda, Jiří Pirunčík, Vladimír Kuzmiak, Jiří Čtyroký, Jiří Petráček, Novel effects and functionalities in subwavelength photonic and plasmonic structures - Theoretical studies and simulations,"invited talk, April 2017, VŠB – TU Ostrava, Ostrava, Czech Republic.

[21] Milan Burda, Pavel Kwiecien, Jan Fiala, Ivan Richter, Local and nonlocal responses in nanoplasmonics, In: Abstract Book, SCPOC 2016 - 20th Slovak-Czech-Polish Optical Conference on Wave and Quantum Aspects of Contemporary Optics (Jasná, Slovakia, 5-9 September 2016), p. 69

Seznam použitých zdrojů

- [1] Maier, S. A.: *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. New York, NY: Springer US, 2007, ISBN 978-0-387-33150-8 978-0-387-37825-1, doi:10.1007/0-387-37825-1.
- [2] Mie, G.: Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, ročník 330, č. 3, 1908: s. 377–445, ISSN 00033804, 15213889, doi:10.1002/andp.19083300302.
- [3] Hopfield, J. J.; Thomas, D. G.: Theoretical and Experimental Effects of Spatial Dispersion on the Optical Properties of Crystals. *Physical Review*, ročník 132, č. 2, Říjen 1963: s. 563–572, ISSN 0031-899X, doi:10.1103/PhysRev.132.563.
- [4] Birman, J. L.; Sein, J. J.: Optics of Polaritons in Bounded Media. *Physical Review B*, ročník 6, č. 6, Zář 1972: s. 2482–2490, ISSN 0556-2805, doi:10.1103/PhysRevB.6.2482.
- [5] Ting, C.-S.; Frankel, M.; Birman, J.: Electrodynamics of Bounded Spatially Dispersive Media: The Additional Boundary Conditions. *Solid State Communications*, ročník 17, č. 10, Listopad 1975: s. 1285–1289, ISSN 00381098, doi:10.1016/0038-1098(75)90688-2.
- [6] Maradudin, A. A.; Mills, D. L.: Effect of Spatial Dispersion on the Properties of a Semi-Infinite Dielectric. *Physical Review B*, ročník 7, č. 6, Březen 1973: s. 2787–2810, ISSN 0556-2805, doi:10.1103/PhysRevB.7.2787.
- [7] Lagois, J.; Fischer, B.: Experimental Observation of Surface Exciton Polaritons. *Physical Review Letters*, ročník 36, č. 12, Březen 1976: s. 680–683, ISSN 0031-9007, doi:10.1103/PhysRevLett.36.680.
- [8] Ruppin, R.: Attenuated Total Reflection from a Nonlocal Dielectric with an Excitonic Surface Potential. *Journal de Physique*, ročník 47, č. 2, 1986: s. 259–262, ISSN 0302-0738, doi:10.1051/jphys:01986004702025900.
- [9] Halevi, P.; Fuchs, R.: Generalised Additional Boundary Condition for Non-Local Dielectrics. II. Surface Polaritons. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, ročník 17, č. 21, Červenec 1984: s. 3889–3901, ISSN 0022-3719, doi:10.1088/0022-3719/17/21/018.
- [10] Kawabata, A.; Kubo, R.: Electronic Properties of Fine Metallic Particles. II. Plasma Resonance Absorption. *Journal of the Physical Society of Japan*, ročník 21, č. 9, Zář 1966: s. 1765–1772, ISSN 0031-9015, 1347-4073, doi:10.1143/JPSJ.21.1765.
- [11] Apell, P.; Ljungbert, Å.: A General Non-Local Theory for the Electromagnetic Response of a Small Metal Particle. *Physica Scripta*, ročník 26, č. 2, Srpen 1982: s. 113–118, ISSN 0031-8949, 1402-4896, doi:10.1088/0031-8949/26/2/010.

- [12] Crowell, J.; Ritchie, R. H.: Radiative Decay of Coulomb-Stimulated Plasmons in Spheres. *Physical Review*, ročník 172, č. 2, Srpen 1968: s. 436–440, ISSN 0031-899X, doi:10.1103/PhysRev.172.436.
- [13] Mortensen, N. A.; Raza, S.; Wubs, M.; aj.: A Generalized Non-Local Optical Response Theory for Plasmonic Nanostructures. *Nature Communications*, ročník 5, č. 1, Květen 2014: str. 3809, ISSN 2041-1723, doi:10.1038/ncomms4809.
- [14] Raza, S.; Yan, W.; Stenger, N.; aj.: Blueshift of the Surface Plasmon Resonance in Silver Nanoparticles: Substrate Effects. *Optics Express*, ročník 21, č. 22, Listopad 2013: str. 27344, ISSN 1094-4087, doi:10.1364/OE.21.027344.
- [15] Hohenester, U.: Quantum Corrected Model for Plasmonic Nanoparticles: A Boundary Element Method Implementation. *Physical Review B*, ročník 91, č. 20, Květen 2015: str. 205436, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.91.205436.
- [16] Zhu, W.; Esteban, R.; Borisov, A. G.; aj.: Quantum Mechanical Effects in Plasmonic Structures with Subnanometre Gaps. *Nature Communications*, ročník 7, č. 1, Červen 2016: str. 11495, ISSN 2041-1723, doi:10.1038/ncomms11495.
- [17] Tong, L.; Wei, H.; Zhang, S.; aj.: Recent Advances in Plasmonic Sensors. *Sensors*, ročník 14, č. 5, Květen 2014: s. 7959–7973, ISSN 1424-8220, doi:10.3390/s140507959.
- [18] Roh, S.; Chung, T.; Lee, B.: Overview of the Characteristics of Micro- and Nano-Structured Surface Plasmon Resonance Sensors. *Sensors*, ročník 11, č. 2, Leden 2011: s. 1565–1588, ISSN 1424-8220, doi:10.3390/s110201565.
- [19] Lee, D. E.; Lee, Y. J.; Shin, E.; aj.: Mach-Zehnder Interferometer Refractive Index Sensor Based on a Plasmonic Channel Waveguide. *Sensors*, ročník 17, č. 11, Listopad 2017: str. 2584, ISSN 1424-8220, doi:10.3390/s17112584.
- [20] Lai, C.-H.; Wang, G.-A.; Ling, T.-K.; aj.: Near Infrared Surface-Enhanced Raman Scattering Based on Star-Shaped Gold/Silver Nanoparticles and Hyperbolic Metamaterial. *Scientific Reports*, ročník 7, č. 1, Červenec 2017: str. 5446, ISSN 2045-2322, doi:10.1038/s41598-017-05939-0.
- [21] Toscano, G.; Raza, S.; Xiao, S.; aj.: Surface-Enhanced Raman Spectroscopy: Non-local Limitations. *Optics Letters*, ročník 37, č. 13, Červenec 2012: str. 2538, ISSN 0146-9592, 1539-4794, doi:10.1364/OL.37.002538.
- [22] Stampelcoskie, K. G.; Grenier, M.; Scaiano, J. C.: Self-Assembled Dipole Nanolasers. *Journal of the American Chemical Society*, ročník 136, č. 8, Únor 2014: s. 2956–2959, ISSN 0002-7863, 1520-5126, doi:10.1021/ja411696r.
- [23] Huang, Y.; Xiao, J. J.; Gao, L.: Antibonding and Bonding Lasing Modes with Low Gain Threshold in Nonlocal Metallic Nanoshell. *Optics Express*, ročník 23, č. 7, Duben 2015: str. 8818, ISSN 1094-4087, doi:10.1364/OE.23.008818.
- [24] Spinelli, P.; Ferry, V. E.; van de Groep, J.; aj.: Plasmonic Light Trapping in Thin-Film Si Solar Cells. *Journal of Optics*, ročník 14, č. 2, Únor 2012: str. 024002, ISSN 2040-8978, 2040-8986, doi:10.1088/2040-8978/14/2/024002.
- [25] Kluczyk, K.; Jacak, L.; Jacak, W.; aj.: Microscopic Electron Dynamics in Metal Nanoparticles for Photovoltaic Systems. *Materials*, ročník 11, č. 7, Červen 2018: str. 1077, ISSN 1996-1944, doi:10.3390/ma11071077.

- [26] Toscano, G.; Straubel, J.; Kwiatkowski, A.; aj.: Resonance Shifts and Spill-out Effects in Self-Consistent Hydrodynamic Nanoplasmonics. *Nature Communications*, ročník 6, č. 1, Květen 2015: str. 7132, ISSN 2041-1723, doi:10.1038/ncomms8132.
- [27] Skjølstrup, E. J. H.; Søndergaard, T.; Pedersen, T. G.: Quantum Spill-out in Few-Nanometer Metal Gaps: Effect on Gap Plasmons and Reflectance from Ultrasharp Groove Arrays. *Physical Review B*, ročník 97, č. 11, Březen 2018: str. 115429, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.97.115429.
- [28] Li, X.; Fang, H.; Weng, X.; aj.: Electronic Spill-out Induced Spectral Broadening in Quantum Hydrodynamic Nanoplasmonics. *Optics Express*, ročník 23, č. 23, Listopad 2015: str. 29738, ISSN 1094-4087, doi:10.1364/OE.23.029738.
- [29] Feibelman, P.: Surface Electromagnetic Fields. *Progress in Surface Science*, ročník 12, č. 4, 1982: s. 287–407, ISSN 00796816, doi:10.1016/0079-6816(82)90001-6.
- [30] Yang, F.; Ding, K.: Electron Spill-Out Effect in Singular Metasurfaces. *Photonics*, ročník 8, č. 5, Květen 2021: str. 154, ISSN 2304-6732, doi:10.3390/photonics8050154.
- [31] Mortensen, N. A.; Gonçalves, P. A. D.; Shuklin, F. A.; aj.: Surface-Response Functions Obtained from Equilibrium Electron-Density Profiles. *Nanophotonics*, ročník 10, č. 14, Říjen 2021: s. 3647–3657, ISSN 2192-8614, doi:10.1515/nanoph-2021-0084.
- [32] Yan, W.: Hydrodynamic Theory for Quantum Plasmonics: Linear-response Dynamics of the Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review B*, ročník 91, č. 11, Březen 2015: str. 115416, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.91.115416.
- [33] Ciraci, C.; Della Sala, F.: Quantum Hydrodynamic Theory for Plasmonics: Impact of the Electron Density Tail. *Physical Review B*, ročník 93, č. 20, Květen 2016: str. 205405, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.93.205405.
- [34] Ding, K.; Chan, C. T.: Plasmonic Modes of Polygonal Rods Calculated Using a Quantum Hydrodynamics Method. *Physical Review B*, ročník 96, č. 12, Zář 2017: str. 125134, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.96.125134.
- [35] Esteban, R.; Zugarramurdi, A.; Zhang, P.; aj.: A Classical Treatment of Optical Tunneling in Plasmonic Gaps: Extending the Quantum Corrected Model to Practical Situations. *Faraday Discussions*, ročník 178, 2015: s. 151–183, ISSN 1359-6640, 1364-5498, doi:10.1039/C4FD00196F.
- [36] Kirakosyan, A. S.; Stockman, M. I.; Shahbazyan, T. V.: Surface Plasmon Lifetime in Metal Nanoshells. *Physical Review B*, ročník 94, č. 15, Říjen 2016: str. 155429, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.94.155429.
- [37] Khurgin, J. B.: Ultimate Limit of Field Confinement by Surface Plasmon Polaritons. *Faraday Discussions*, ročník 178, 2015: s. 109–122, ISSN 1359-6640, 1364-5498, doi:10.1039/C4FD00193A.
- [38] Bruus, H.; Flensberg, K.: *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Graduate Texts, Oxford ; New York: Oxford University Press, 2004, ISBN 978-0-19-856633-5.
- [39] Khurgin, J. B.: How to Deal with the Loss in Plasmonics and Metamaterials. *Nature Nanotechnology*, ročník 10, č. 1, Leden 2015: s. 2–6, ISSN 1748-3387, 1748-3395, doi:10.1038/nnano.2014.310.

- [40] Halperin, W. P.: Quantum Size Effects in Metal Particles. *Reviews of Modern Physics*, ročník 58, č. 3, Červenec 1986: s. 533–606, ISSN 0034-6861, doi:10.1103/RevModPhys.58.533.
- [41] Altewischer, E.; van Exter, M. P.; Woerdman, J. P.: Plasmon-Assisted Transmission of Entangled Photons. *Nature*, ročník 418, č. 6895, Červenec 2002: s. 304–306, ISSN 0028-0836, 1476-4687, doi:10.1038/nature00869.
- [42] Nga, D. T. T.; Lan, N. T. P.; Viet, N. A.: Second Quantization Model of Surface Plasmon Polariton at Metal Planar Surface. *Journal of Physics: Conference Series*, ročník 627, Červen 2015: str. 012018, ISSN 1742-6596, doi:10.1088/1742-6596/627/1/012018.
- [43] Tame, M. S.; McEneaney, K. R.; Özdemir, Ş. K.; aj.: Quantum Plasmonics. *Nature Physics*, ročník 9, č. 6, Červen 2013: s. 329–340, ISSN 1745-2473, 1745-2481, doi:10.1038/nphys2615.
- [44] Zapata Herrera, M.; Aizpurua, J.; Kazansky, A. K.; aj.: Plasmon Response and Electron Dynamics in Charged Metallic Nanoparticles. *Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids*, ročník 32, č. 11, Březen 2016: s. 2829–2840, ISSN 0743-7463, 1520-5827, doi:10.1021/acs.langmuir.6b00112.
- [45] Varas, A.; García-González, P.; Feist, J.; aj.: Quantum Plasmonics: From Jellium Models to Ab Initio Calculations. *Nanophotonics*, ročník 5, č. 3, Srpen 2016: s. 409–426, ISSN 2192-8614, 2192-8606, doi:10.1515/nanoph-2015-0141.
- [46] Lejaeghere, K.; Bihlmayer, G.; Björkman, T.; aj.: Reproducibility in Density Functional Theory Calculations of Solids. *Science*, ročník 351, č. 6280, Březen 2016: str. aad3000, ISSN 0036-8075, 1095-9203, doi:10.1126/science.aad3000.
- [47] Faber, F. A.; Lindmaa, A.; von Lilienfeld, O. A.; aj.: Machine Learning Energies of 2 Million Elpasolite (A B C 2 D 6) Crystals. *Physical Review Letters*, ročník 117, č. 13, Září 2016: str. 135502, ISSN 0031-9007, 1079-7114, doi:10.1103/PhysRevLett.117.135502.
- [48] Taylor, P. L.; Heinonen, O.: *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge, UK ; New York, NY: Cambridge University Press, 2002, ISBN 978-0-521-77103-0 978-0-521-77827-5.
- [49] Mahan, G. D.: *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids, New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, třetí vydání, 2000, ISBN 978-0-306-46338-9.
- [50] Gross, E. K. U.; Runge, E.; Heinonen, O.: *Many-Particle Theory*. Bristol ; Philadelphia: A. Hilger, 1991, ISBN 978-0-7503-0072-8 978-0-7503-0155-8.
- [51] Giuliani, G.; Vignale, G.: *Quantum Theory of the Electron Liquid*. Cambridge, UK ; New York: Cambridge University Press, 2005, ISBN 978-0-521-82112-4.
- [52] Girvin, S. M.; Yang, K.: *Modern Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, první vydání, Únor 2019, ISBN 978-1-316-48064-9 978-1-107-13739-4, doi:10.1017/9781316480649.
- [53] Bohm, D.; Pines, D.: A Collective Description of Electron Interactions: III. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas. *Physical Review*, ročník 92, č. 3, Listopad 1953: s. 609–625, ISSN 0031-899X, doi:10.1103/PhysRev.92.609.

- [54] Kittel, C.: *Introduction to Solid State Physics*. Hoboken, NJ: Wiley, 8 vydání, 2005, ISBN 978-0-471-41526-8.
- [55] Willatzen, M.; Wang, Z. L.: Contact Electrification by Quantum-Mechanical Tunneling. *Research*, ročník 2019, Leden 2019: str. 2019/6528689, ISSN 2639-5274, doi: 10.34133/2019/6528689.
- [56] Mortensen, N. A.: Nonlocal Formalism for Nanoplasmonics: Phenomenological and Semi-Classical Considerations. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, ročník 11, č. 4, Listopad 2013: s. 303–309, ISSN 15694410, doi:10.1016/j.photonics.2013.06.002.
- [57] Raza, S.; Bozhevolnyi, S. I.; Wubs, M.; aj.: Nonlocal Optical Response in Metallic Nanostructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, ročník 27, č. 18, Květen 2015: str. 183204, ISSN 0953-8984, 1361-648X, doi:10.1088/0953-8984/27/18/183204.
- [58] Wubs, M.: Classification of Scalar and Dyadic Nonlocal Optical Response Models. *Optics Express*, ročník 23, č. 24, Listopad 2015: str. 31296, ISSN 1094-4087, doi: 10.1364/OE.23.031296.
- [59] Hiremath, K. R.; Zschiedrich, L.; Schmidt, F.: Numerical Solution of Nonlocal Hydrodynamic Drude Model for Arbitrary Shaped Nano-Plasmonic Structures Using Nédélec Finite Elements. *Journal of Computational Physics*, ročník 231, č. 17, Červenec 2012: s. 5890–5896, ISSN 00219991, doi:10.1016/j.jcp.2012.05.013.
- [60] Kupresak, M.; Zheng, X.; Vandenbosch, G. A. E.; aj.: Comparison of Hydrodynamic Models for the Electromagnetic Nonlocal Response of Nanoparticles. *Advanced Theory and Simulations*, ročník 1, č. 12, Prosinec 2018: str. 1800076, ISSN 25130390, doi:10.1002/adts.201800076.
- [61] Zhang, H.-F.; Liu, S.-B.; Zhen, J.-P.; aj.: The Right Circular Polarized Waves in the Three-Dimensional Anisotropic Dispersive Photonic Crystals Consisting of the Magnetized Plasma and Uniaxial Material as the Faraday Effects Considered. *Physics of Plasmas*, ročník 21, č. 3, Březen 2014: str. 032127, ISSN 1070-664X, 1089-7674, doi:10.1063/1.4869729.
- [62] Raza, S.; Toscano, G.; Jauho, A.-P.; aj.: Unusual Resonances in Nanoplasmonic Structures Due to Nonlocal Response. *Physical Review B*, ročník 84, č. 12, Zář 2011: str. 121412, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.84.121412.
- [63] Andrade-Neto, A. V.: Dielectric Function for Free Electron Gas: Comparison between Drude and Lindhard Models. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, ročník 39, č. 2, Prosinec 2016, ISSN 1806-1117, doi:10.1590/1806-9126-rbef-2016-0206.
- [64] Smith, H.: The Lindhard Function and the Teaching of Solid State Physics. *Physica Scripta*, ročník 28, č. 3, Zář 1983: s. 287–293, ISSN 0031-8949, 1402-4896, doi: 10.1088/0031-8949/28/3/005.
- [65] Forstmann, F.; Gerhardt, R. R.: Metal optics near the plasma frequency. In *Festkörperprobleme 22*, ročník 22, editace P. Grosse Aachen, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1982, ISBN 978-3-528-08028-0, s. 291–323, doi:10.1007/BFb0107944.
- [66] Fuchs, R.; Kliever, K. L.: Surface Plasmon in a Semi-Infinite Free-Electron Gas. *Physical Review B*, ročník 3, č. 7, Duben 1971: s. 2270–2278, ISSN 0556-2805, doi: 10.1103/PhysRevB.3.2270.

- [67] Raza, S.; Toscano, G.; Jauho, A.-P.; aj.: Unusual Resonances in Nanoplasmonic Structures Due to Nonlocal Response. *Physical Review B*, ročník 84, č. 12, Září 2011: str. 121412, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.84.121412.
- [68] McMahon, J. M.; Gray, S. K.; Schatz, G. C.: Calculating Nonlocal Optical Properties of Structures with Arbitrary Shape. *Physical Review B*, ročník 82, č. 3, Červenec 2010: str. 035423, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.82.035423.
- [69] Mortensen, N. A.: Mesoscopic Electrodynamics at Metal Surfaces: — From Quantum-Corrected Hydrodynamics to Microscopic Surface-Response Formalism. *Nanophotonics*, ročník 10, č. 10, Srpen 2021: s. 2563–2616, ISSN 2192-8606, 2192-8614, doi:10.1515/nanoph-2021-0156.
- [70] Golestanizadeh, T.; Zarifi, A.; Jalali, T.; aj.: Hydrodynamic Acoustic Plasmon Resonances in Semiconductor Nanowires and Their Dimers. *Journal of the Optical Society of America B*, ročník 36, č. 10, Říjen 2019: str. 2712, ISSN 0740-3224, 1520-8540, doi:10.1364/JOSAB.36.002712.
- [71] David, C.; García de Abajo, F. J.: Spatial Nonlocality in the Optical Response of Metal Nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*, ročník 115, č. 40, Říjen 2011: s. 19470–19475, ISSN 1932-7447, 1932-7455, doi:10.1021/jp204261u.
- [72] Quinten, M.: *Optical Properties of Nanoparticle Systems: Mie and Beyond*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2011, ISBN 978-3-527-41043-9.
- [73] Mishchenko, M. I.; Travis, L. D.; Lacis, A. A.: *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles*. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 2002, ISBN 978-0-521-78252-4.
- [74] Balanis, C. A.: *Advanced Engineering Electromagnetics*. Hoboken, N.J: John Wiley & Sons, druhé vydání, 2012, ISBN 978-0-470-58948-9.
- [75] Stabler, R. C.: Low-Energy Electron-electron Bremsstrahlung. *Nature*, ročník 206, č. 4987, Květen 1965: s. 922–923, ISSN 0028-0836, 1476-4687, doi:10.1038/206922a0.
- [76] Diver, D. A.: *A Plasma Formulary for Physics, Technology, and Astrophysics*. Berlin ; New York: Wiley-VCH, první vydání, 2001, ISBN 978-3-527-40294-6.
- [77] Diaw, A.; Murillo, M. S.: A Viscous Quantum Hydrodynamics Model Based on Dynamic Density Functional Theory. *Scientific Reports*, ročník 7, č. 1, Listopad 2017: str. 15352, ISSN 2045-2322, doi:10.1038/s41598-017-14414-9.
- [78] Spurk, J. H.; Aksel, N.; Spurk, J. H.: *Fluid Mechanics*. Berlin Heidelberg: Springer, druhé vydání, 2008, ISBN 978-3-540-73536-6 978-3-642-09267-1.
- [79] Poddubny, A.; Iorsh, I.; Belov, P.; aj.: Hyperbolic Metamaterials. *Nature Photonics*, ročník 7, č. 12, Prosinec 2013: s. 948–957, ISSN 1749-4885, 1749-4893, doi:10.1038/nphoton.2013.243.
- [80] Li, T.; Khurgin, J. B.: Hyperbolic Metamaterials: Beyond the Effective Medium Theory. *Optica*, ročník 3, č. 12, Prosinec 2016: str. 1388, ISSN 2334-2536, doi:10.1364/OPTICA.3.001388.
- [81] Guo, Z.; Jiang, H.; Chen, H.: Hyperbolic Metamaterials: From Dispersion Manipulation to Applications. *Journal of Applied Physics*, ročník 127, č. 7, Únor 2020: str. 071101, ISSN 0021-8979, 1089-7550, doi:10.1063/1.5128679.

- [82] Verhagen, E.; de Waele, R.; Kuipers, L.; aj.: Three-Dimensional Negative Index of Refraction at Optical Frequencies by Coupling Plasmonic Waveguides. *Physical Review Letters*, ročník 105, č. 22, Listopad 2010: str. 223901, ISSN 0031-9007, 1079-7114, doi:10.1103/PhysRevLett.105.223901.
- [83] Bang, S.; So, S.; Rho, J.: Realization of Broadband Negative Refraction in Visible Range Using Vertically Stacked Hyperbolic Metamaterials. *Scientific Reports*, ročník 9, č. 1, Říjen 2019: str. 14093, ISSN 2045-2322, doi:10.1038/s41598-019-50434-3.
- [84] Nguyen, H.; Park, J.; Kang, S.; aj.: Surface Plasmon Resonance: A Versatile Technique for Biosensor Applications. *Sensors*, ročník 15, č. 5, Květen 2015: s. 10481–10510, ISSN 1424-8220, doi:10.3390/s150510481.
- [85] Uddin, S. M. A.; Chowdhury, S. S.; Kabir, E.: Numerical Analysis of a Highly Sensitive Surface Plasmon Resonance Sensor for SARS-CoV-2 Detection. *Plasmonics (Norwell, Mass.)*, ročník 16, č. 6, Prosinec 2021: s. 2025–2037, ISSN 1557-1955, 1557-1963, doi:10.1007/s11468-021-01455-0.
- [86] Barchiesi, D.; Gharbi, T.; Cakir, D.; aj.: Performance of Surface Plasmon Resonance Sensors Using Copper/Copper Oxide Films: Influence of Thicknesses and Optical Properties. *Photonics*, ročník 9, č. 2, Únor 2022: str. 104, ISSN 2304-6732, doi:10.3390/photonics9020104.
- [87] Feis, J.; Mnasri, K.; Khrabustovskyi, A.; aj.: Surface Plasmon Polaritons Sustained at the Interface of a Nonlocal Metamaterial. *Physical Review B*, ročník 98, č. 11, Zář 2018: str. 115409, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.98.115409.
- [88] David, C.; Mortensen, N. A.; Christensen, J.: Perfect Imaging, Epsilon-near Zero Phenomena and Waveguiding in the Scope of Nonlocal Effects. *Scientific Reports*, ročník 3, č. 1, Srpen 2013: str. 2526, ISSN 2045-2322, doi:10.1038/srep02526.
- [89] Pitelet, A.; Mallet, E.; Ajib, R.; aj.: Plasmonic Enhancement of Spatial Dispersion Effects in Prism Coupler Experiments. *Physical Review B*, ročník 98, č. 12, Zář 2018: str. 125418, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.98.125418.
- [90] Yang, H.; Meng, X.; Wu, S.; aj.: Numerical Surface-Corrected Nonlocal Electrodynamical Model for Nanophotonic Structures. *Journal of the Optical Society of America B*, ročník 35, č. 6, Červen 2018: str. 1442, ISSN 0740-3224, 1520-8540, doi:10.1364/JOSAB.35.001442.
- [91] Taghizadeh, A.; Pedersen, T. G.: Plasmons in Ultra-Thin Gold Slabs with Quantum Spill-out: Fourier Modal Method, Perturbative Approach, and Analytical Model. *Optics Express*, ročník 27, č. 25, Prosinec 2019: str. 36941, ISSN 1094-4087, doi:10.1364/OE.27.036941.
- [92] Raza, S.; Christensen, T.; Wubs, M.; aj.: Nonlocal Response in Thin-Film Waveguides: Loss versus Nonlocality and Breaking of Complementarity. *Physical Review B*, ročník 88, č. 11, Zář 2013: str. 115401, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.88.115401.
- [93] Xiao, Y.; Li, J.; Pan, T.; aj.: Impact of Nonlocal Response on Surface Plasmon Polaritons in an Asymmetrical Structure: Impact of Nonlocal Response on Surface Plasmon Polaritons. *physica status solidi (b)*, ročník 252, č. 1, Leden 2015: s. 187–191, ISSN 03701972, doi:10.1002/pssb.201451238.

- [94] Benedicto, J.; Pollès, R.; Ciraci, C.; aj.: Numerical Tool to Take Nonlocal Effects into Account in Metallo-Dielectric Multilayers. *Journal of the Optical Society of America A*, ročník 32, č. 8, Srpen 2015: str. 1581, ISSN 1084-7529, 1520-8532, doi: 10.1364/JOSAA.32.001581.
- [95] Macleod, H. A.: *Thin-Film Optical Filters*. Bristol ; Philadelphia: Institute of Physics Pub, třetí vydání, 2001, ISBN 978-0-7503-0688-1.
- [96] Born, M.; Wolf, E.; Bhatia, A. B.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference, and Diffraction of Light*. Cambridge: Cambridge University Press, seventh (expanded) anniversary edition, 60th anniversary edition vydání, 2019, ISBN 978-1-108-47743-7.
- [97] Acquaroli, L. N.: Matrix Method for Thin Film Optics. Září 2018, <1809.07708>.
- [98] Chilwell, J.; Hodgkinson, I.: Thin-Films Field-Transfer Matrix Theory of Planar Multilayer Waveguides and Reflection from Prism-Loaded Waveguides. *Journal of the Optical Society of America A*, ročník 1, č. 7, Červenec 1984: str. 742, ISSN 1084-7529, 1520-8532, doi:10.1364/JOSAA.1.000742.
- [99] Maier, S. A.: *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. New York, NY: Springer, 2010, ISBN 978-1-4419-4113-8.
- [100] Palik, E. D.; Ghosh, G.: *Handbook of Optical Constants of Solids*. San Diego: Academic Press, 1998, ISBN 978-0-12-544415-6.
- [101] Akimov, Y.; Pam, M. E.; Sun, S.: Kretschmann-Raether Configuration: Revision of the Theory of Resonant Interaction. *Physical Review B*, ročník 96, č. 15, Říjen 2017: str. 155433, ISSN 2469-9950, 2469-9969, doi:10.1103/PhysRevB.96.155433.
- [102] Jakoby, B.: The Relation between Relaxation Time, Mean Free Path, Collision Time and Drift Velocity—Pitfalls and a Proposal for an Approach Illustrating the Essentials. *European Journal of Physics*, ročník 30, č. 1, Leden 2009: s. 1–12, ISSN 0143-0807, 1361-6404, doi:10.1088/0143-0807/30/1/001.
- [103] Yang, H. U.; D'Archangel, J.; Sundheimer, M. L.; aj.: Optical Dielectric Function of Silver. *Physical Review B*, ročník 91, č. 23, Červen 2015: str. 235137, ISSN 1098-0121, 1550-235X, doi:10.1103/PhysRevB.91.235137.
- [104] Kittelson, J. B.: *The Physics of Solids*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press, first edition vydání, 2016, ISBN 978-0-19-874290-6.
- [105] Granet, G.; Guizal, B.: Efficient Implementation of the Coupled-Wave Method for Metallic Lamellar Gratings in TM Polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, ročník 13, č. 5, Květen 1996: str. 1019, ISSN 1084-7529, 1520-8532, doi:10.1364/JOSAA.13.001019.
- [106] Davids, P. S.: Normal Vector Approach to Fourier Modal Scattering from Planar Periodic Photonic Structures. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, ročník 43, Únor 2021: str. 100864, ISSN 15694410, doi: 10.1016/j.photonics.2020.100864.
- [107] Kwiecien, P.: *Aperiodic rigorous coupled wave analysis*. Diploma thesis, Department of Physical Electronics, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Prague, 2008.

-
- [108] Lalanne, P.; Morris, G. M.: Highly Improved Convergence of the Coupled-Wave Method for TM Polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, ročník 13, č. 4, Duben 1996: str. 779, ISSN 1084-7529, 1520-8532, doi:10.1364/JOSAA.13.000779.
- [109] Kwiecien, P.; Burda, M.; Richter, I.: Nonlocal Fourier Modal Method for Analyzing Nonlocal Plasmonic Periodic Nanostructures. *Journal of the Optical Society of America B*, ročník 40, č. 3, Březen 2023: str. 491, ISSN 0740-3224, 1520-8540, doi:10.1364/JOSAB.477327.

Dodatek

A.1 Vlnová funkce mnohočásticového systému fermionů

Jak je dobře známo, fermiony mají tu vlastnost, že se dvě částice nemohou nacházet ve stejných kvantových stavech, to vyplývá z Pauliho vylučovacího principu. Matematicky je toto pravidlo vyjádřeno antisymetričností vlnové funkce mnohočásticového systému fermionů a jako důsledek lze odvodit specifické vztahy anti-komutačních relací pro kreační a anihilační operátory, které jsou analogií komutačních relací pro systém bosonů. Než se k těmto vztahům dostaneme je na tomto místě vhodné učinit několik poznámek k samotným tvarům možných zápisů vlnové funkce pro mnohočásticový systém fermionů.

A.1.1 Slaterův determinant

Známý Pauliho vylučovací princip, tedy vlastnost, že nemohou dva fermiony obsadit tentýž kvantový stav, je možné zahrnout do mnohočásticové vlnové funkce pomocí předpokladu o její antisymetričnosti, což lze matematicky zajistit Slaterovým determinanem (A.1) spin-orbitálních jednočásticových vlnových funkcí jednotlivých fermionů $\chi(\mathbf{x})$, kde proměnná \mathbf{x} pozici a spin fermionu.

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_1(\mathbf{x}_1) & \chi_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & \chi_N(\mathbf{x}_1) \\ \chi_1(\mathbf{x}_2) & \chi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \chi_N(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_1(\mathbf{x}_N) & \chi_2(\mathbf{x}_N) & \cdots & \chi_N(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Jakkoliv by se mohlo zdát, že je Slaterovým determinanem nalezena mnohočásticová vlnová funkce pomocí vlnových spin-orbitálních funkcí jednotlivých fermionů, je nutné poznamenat, že se jedná jen o aproximaci a přesnější vyjádření mnohočásticových vlnových funkcí je možné hledat pomocí lineárních kombinací Slaterových determinantů. Je možné též využít intuitivní kritérium, že mnohočásticová vlnová funkce definovaná Slaterovým determinanem je funkcí s maximálním překryvem s hledanou mnohočásticovou vlnovou funkcí.

A.2 Vlnová funkce systému fermionů ve Fockově reprezentaci

Vlnové funkce ve Fockově reprezentaci lze definovat jako vlastní čísla operátoru počtu částic na jednotlivých kvantových stavech, jinými slovy je možné zavést nové značení

vlnové funkce s takové, že na jednotlivých pozicích označující daný kvantový stav je číselně uvedeno obsazenost daného stavu. Konkrétně vlnová funkce v podobě $|1, 2\rangle$ má význam, že první kvantový stav má obsazenost jedna a druhý kvantový stav má obsazenost dva. Operátor počtu částic druhého stavu tedy dá: $\hat{n}_2 |1, 2\rangle = 2 |1, 2\rangle$. Nutné je však říci, že je velice podstatné samotné definování kvantového stavu. Pokud daný stav bude mít význam spin-orbitálního kvantového stavu například v atomu, pak pro Fermiony z Pauliho vylučovacího principu vyplývá, že obsazenost daného stavu může být pouze 0 nebo 1. Obdobně jako v případě bosonů je možné zavést kreační a anihilační operátory, které zvýší nebo sníží obsazenost kvantového stavu. Jakkoliv pro fermiony není možné najít vyjádření kreačního a anihilačního operátoru pomocí operátoru hybnosti a souřadnice jako v případě bosonových operátorů, je možné jejich akci na vlnovou funkci zavést definičně:

$$\hat{c}_k^\dagger |.., n_k, ..\rangle = (1 - n_k)(-1)^{\alpha_k} |.., n_k + 1, ..\rangle, \quad \alpha_k = \sum_{l < k} n_l \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{c}_k |.., n_k, ..\rangle = n_k(-1)^{\alpha_k} |.., n_k - 1, ..\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Analogickým způsobem, jako v případě bosonových kreačních a anihilačních operátorů, lze zavést operátor obsazenosti kvantového stavu, vzhledem k Pauliho vylučovacímu principu může obsazenost stavu v reálném prostoru v bodě a nabývat hodnot 0 nebo 1, v úsporném značení mnoha elektronové vlnové funkce $|n_a\rangle$ platí:

$$\hat{c}_a^\dagger \hat{c}_a |n_a\rangle = \hat{n}_a |n_a\rangle = n_a |n_a\rangle, \quad (\text{A.4})$$

kde n_a nabývá hodnoty 0 nebo 1, součtem přes všechny body prostoru a v daném objemu V dá operátor $\sum_a \hat{n}_a$ akci na $|n_a\rangle$ celkový počet elektronů. Pro Fermionové kreační a anihilační operátory platí následující komutační a anti-komutační relace vycházející opět z Pauliho vylučovacího principu:

$$[\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_k^\dagger]_+ = [\hat{c}_i, \hat{c}_k] = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$[\hat{c}_i, \hat{c}_k^\dagger] = \delta_{i,k}. \quad (\text{A.6})$$

Vlastnosti Kroneckerovy delta funkce lze s výhodou využít při úpravě komplikovaných operátorových výrazů obsahující kreační a anihilační operátory. Pomocí zmíněných relací (A.5) a (A.6) a právě vlastností Kroneckerovy delta funkce lze provést následující úpravu vztahu využitého v odvození Lindhardovy funkce permitivity elektronového plynu:

$$\begin{aligned} & [\hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1}] = \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} - \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} = \\ & \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger (\delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} - \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma}) \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} - \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger (\delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} - \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1}) \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} = \\ & \delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} - \delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} + (\hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger) \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} (\hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger) \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} &= \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} - \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} = \\ & \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger [\hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1}, \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma}] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} - \delta_{\sigma,\sigma_1} \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} | \psi \rangle &= \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} \langle \psi | \hat{c}_{\mathbf{r}',\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r}'_1,\sigma_1} | \psi \rangle - \\ & \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} \langle \psi | \hat{c}_{\mathbf{r}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{r},\sigma} | \psi \rangle = \delta_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'_1} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} (\eta_{\mathbf{r}',\sigma} - \eta_{\mathbf{r},\sigma}) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

A.3 Model žele

Hamiltonián systému mnoha elektronového plynu zahrnující kinetickou energii, vzájemnou elektron-elektronovou interakci (korelační a výměnně korelační energii), interakci elektronů s iontovým pozadím a vzájemnou interakci iontů, je možné uvést v následujícím tvaru:

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|} + \hat{\mathbf{H}}_{e-b} + \hat{\mathbf{H}}_{b-b} \quad (\text{A.10})$$

Níže je uvedena transformace jednotlivých členů tohoto Hamiltoniánu do prostoru vlnových čísel. Postupnou využitím Fourierova rozvoje, vlastností Fourierovy transformace $\mathbf{r} \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbf{q}$ a delta funkce, lze získat následující vyjádření pro interakční člen vzájemné elektron-elektronové interakce:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{e-e} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|} = \\ & \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \sum_{\mathbf{q}} \left(\int v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) d\mathbf{r} = \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{i \neq j} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) d\mathbf{r} = \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{i \neq j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} (\hat{n}_{\mathbf{q}} \hat{n}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Ve výpočtu (A.11) bylo použito pro Coulumbův potenciál v reálném prostoru značení $v(\mathbf{r})$ a pro jeho transformovanou variantu $v_{\mathbf{q}}$, symbol $\hat{n}_{\mathbf{q}}$ označuje operátor počtu částic ve stavu definovaném vlnovým číslem \mathbf{q} . Zcela analogickým postupem spočívajícím ve využití Fourierova rozvoje, vlastností Fourierovy transformace $\mathbf{r} \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathbf{q}$ a delta funkce, lze získat níže uvedeného vyjádření pro interakční Hamiltonián elektronů a iontového pozadí:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{e-b} &= -e^2 \int \int \sum_{i=1}^N \frac{n_b \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = -e^2 \int \sum_{i=1}^N \frac{n_b}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \\ & -n_b \sum_{i=1}^N \int \int \sum_{\mathbf{q}} \left(\int v(\mathbf{r}_p) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} d\mathbf{r}_p \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} \delta(\mathbf{r}_p - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}')) d\mathbf{r}_p d\mathbf{r}' = \\ & -e^2 n_b \sum_{i=1}^N \int \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}')} d\mathbf{r}' \xrightarrow{\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0}} -n_b v_{\mathbf{q}=0} \hat{N} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Analogickými postupy jako výše lze upravit i interakční člen níže:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{b-b} &= \frac{1}{2} \int \int \frac{n_b(\mathbf{r}) n_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \frac{1}{2} \int \int \frac{n_b^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \\ & \frac{n_b^2}{2} \int \int \int \sum_{\mathbf{q}} \left(\int v(\mathbf{r}_p, \chi) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} d\mathbf{r}_p \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} \delta(\mathbf{r}_p - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')) d\mathbf{r}_p d\mathbf{r}' d\mathbf{r} = \\ & \frac{1}{2} n_b^2 \int \int \int \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_p} \delta(\mathbf{r}_p - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')) d\mathbf{r}_p d\mathbf{r}' d\mathbf{r} = \\ & \frac{n_b^2}{2} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \int \int e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \xrightarrow{\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0}} \frac{1}{2} n_b^2 v_{\mathbf{q}=0} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Součtem přetransformovaných interakčních členů Hamiltoniánu se některé části vzájemně vyruší, některé lze na základě posouzení jejich velikosti vůči ostatním zanedbat. Celkově tak lze získat Hamiltonián žele modelu ve standardním tvaru.