Dipartimento di Fisica "E. Amaldi"

Università degli Studi Roma Tre

Dottorato in Fisica XIX ciclo

Ottica scalare e vettoriale: nuove soluzioni di campo parassiali e applicazioni in microspettroscopia Raman

Omar El Gawhary

Coordinatore
Prof. Orlando Ragnisco

Relatore interno
Prof. Massimo Santarsiero

Relatore esterno
Dott.ssa Lucia G. Quagliano

a Yousef e Ayman.

Che un domani, anche grazie a questo lavoro,
possano essere un po' orgogliosi del loro papà.

Ringrazio sentitamente i miei due relatori, il prof. Massimo Santarsiero e la dr.ssa Lucia G. Quagliano per avermi, rispettivamente, seguito nell'intero corso delle attività di ricerca di dottorato e introdotto nell'entusiasmante mondo della spettroscopia Raman. La mia gratitudine va al referee, dr.ssa Amalia Torre, per tutte le indicazioni fornitemi e le fondamentali correzioni apportate alla bozza di tesi così come per l'indicazione di alcuni riferimenti bibliografici. Sono grato al prof. Antonio di Carlo per avermi suggerito alcune letture sulla geometria differenziale divenute parte della bibliografia. Grazie al dr. Sergio Severini per la collaborazione realizzata in questo ultimo anno. Ringrazio infine la mia famiglia tutta, i miei figli, mia moglie, i miei genitori per essermi stati vicino, come sempre, in questi anni.

Introduzione

L'oggetto di studio principale che ha caratterizzato il lavoro di ricerca di dottorato, di cui la presente tesi vuole dare conto, è stata l'investigazione di nuove soluzioni di campo parassiali per l'ottica. La ragione di ciò è un rinnovato interesse che oggi sembra pervadere gran parte della comunità scientifica al riguardo, interesse che ha introdotto molti elementi di novità nel settore, ma anche aperto nuovi interessanti quesiti. Come esempio di ciò si pensi alla estensione dei membri componenti la famiglia di fasci non diffrangenti e pseudo non diffrangenti, avvenuta solo recentemente, che era rimasta invariata per quasi venti anni. Oppure si possono citare gli studi sul trasferimento del momento angolare, sia orbitale che di spin, di un fascio luminoso, cioè di un campo ottico per il quale si possa individuare una direzione media di propagazione attorno alla quale sia concentrata gran parte dell'energia del campo, quando questo attraversi un mezzo materiale. O, ancora, le analisi su i cosiddetti campi invarianti in forma, che a prescindere dal loro specifico profilo di campo, possiedono un termine di fase geometrica universale in comune, detta fase di Gouy. Altri tipi di campi, vettoriali in questo caso, che stanno suscitando un profondo interesse, sono tutti quelli dotati di stati di polarizzazione non convenzionali, come può essere ad esempio una polarizzazione di tipo radiale, con le linee di campo dirette lungo le semirette uscenti dall'origine degli assi, o azimutale con le linee di campo dirette lungo delle circonferenze concentriche; è dimostrato, infatti, che queste polarizzazioni si conservano durante la propagazione libera e possono trovare impiego in tutta una serie di applicazioni, come la manipolazione di nanoparticelle, l'immagazzinamento di dati, la microscopia ad alta risoluzione. In questo contesto si inserisce la ricerca di dottorato che ci si accinge a descrivere nei dettagli. In particolare si è affrontato uno studio sistematico dell'equazione che governa il moto dei campi parassiali, l'equazione d'onda parassiale, con l'intento di trovare giustificazione della esistenza di nuove soluzioni di campo pseudo non-diffrangenti a modulazione Gaussiana, ovvero ottenute modulando con una funzione di inviluppo Gaussiana i membri componenti la classe di fasci non diffrangenti di cui si è detto all'inizio. L'analisi fatta ci ha permesso di cogliere l'obiettivo prefissato ed inoltre ha fornito gli strumenti per affrontare metodologicamente lo studio delle caratteristiche di simmetria di una campo ottico parassiale. Questo si è reso possibile grazie

alla unione di una descrizione Lagrangiana per il campo e della teoria dei gruppi; il vantaggio di un tale approccio si è rivelato anche nella possibilità di definire, mediante esclusivamente argomenti di simmetria e senza introdurre alcuna ulteriore ipotesi circa il campo e il suo stato di polarizzazione, il momento angolare orbitale per tali campi, usualmente derivato in letteratura ponendo delle ipotesi *ad hoc* aggiuntive. Si è poi effettuata un'analisi della simmetria di invarianza in scala, ricercando la forma della corrente e carica conservate associate, come prescritto dal teorema di Noether.
Sempre nell'ambito di una teoria parassiale, è stata poi introdotta una nuova famiglia di campi, cui si è dato il nome di fasci di Lorentz, per i quali si può dare la propagazione in forma chiusa, e che costituiscono uno dei rari casi di un campo fisicamente realizzabile che non sia dotato di un inviluppo Gaussiano. Essi possono essere un buon modello descrittivo per alcune sorgenti laser, come quelli a doppia eterogiunzione (DH) del tipo $Ga_{1-x}Al_xAs$, per i quali l'usuale modello a fascio Gaussiano sembra inadeguato. Inoltre, come si mostrerà nel dettaglio, essi possono essere una base per un'intera famiglia di campi, cui ci si riferirà come fasci super-Lorentziani, che possono essere utilizzati con successo per approssimare la propagazione di soluzioni a simmetria Cartesiana per le quali la propagazione analitica non sia disponibile.
In molti settori applicativi si sta cercando di verificare gli effetti che fasci con profili e stati di polarizzazione insuali (ovvero differenti dal classico fascio Gaussiano fondamentale convenzionale polarizzato linearmente) possano produrre, e se ad essi possano essere associati dei benefici, in termini di risoluzione, risposta spettrale, ecc. In questo senso, nella seconda parte del presente lavoro si riporterà, invece, di un'attività sperimentale preliminare, che ha interessato la fase finale delle ricerche di dottorato, svolta presso il laboratorio di micro-spettroscopia Raman dell'Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati del CNR. In particolare è stata realizzata l'analisi di micro-spettroscopia Raman di materiali nanostrutturati a semiconduttore sulle cui superfici sia avvenuto adsorbimento di molecole biologiche, una volta che essi siano eccitati da una sorgente convenzionale del tipo detto. E' stata osservata per la prima volta, a conoscenza di chi scrive, la presenza di adenina adsorbita su uno strato di `GaAs` su cui era stato depositato precedentemente un *film* di nanoparticelle di `Ag` e quella di tirosina su *quantum dots* a semiconduttore del tipo `InAs/GaAs`. Nel realizzare tali misure, si è cercato di porre dei riferimenti validi sui cui poter impostare un confronto quando gli stessi campioni vengano, ad esempio, eccitati con un campo dotato di uno stato di polarizzazione inusuale come può essere un fascio luminoso polarizzato radialmente.
Poichè la spettroscopia Raman può essere uno di quei settori in cui i nuovi tipi campi ottici di cui si è detto sopra possono trovare una fruttuosa applicazione e tenuto conto dell'interesse che c'è oggigiorno nello studiare le interazioni tra materiali organici ed inorganici, per esempio per la costruzione di biosensori estremamente sensibili o dispositivi ibridi costituiti da una

parte organica ed una inorganica, possiamo affermare che i risultati sperimentali ottenuti incoraggiano senza dubbio a proseguire la ricerca lungo i percorsi fin qui intrapresi.

Indice

Introduzione **ii**

1 Propagazione e diffrazione in ottica **1**
1.1 Il problema elettromagnetico 1
1.2 I modelli approssimati 2
1.2.1 Sviluppo in onde piane 3
1.2.2 Approssimazione di Fresnel 8
1.2.3 Equazione d'onda parassiale 9
1.3 Oltre l'ottica parassiale scalare 10

2 Campi non diffrangenti e pseudo non diffrangenti **13**
2.1 Soluzioni di campo a sezione invariante 13
2.2 Campi pseudo non-diffrangenti 16

3 Simmetrie in ottica parassiale **19**
3.1 Teoria dei gruppi di Lie 20
3.1.1 Spazi tangenti 22
3.2 Simmetrie dell'equazione parassiale 24
3.3 Formalismo Lagrangiano per campi parassiali 31
3.3.1 Lagrangiana ed equazioni del moto 31
3.3.2 Hamiltoniana, corrente di energia e tensore energia-momento 34
3.3.3 Conservazione del tensore energia-momento 36
3.3.4 Simmetrie, correnti e cariche conservate 38
3.3.5 Invarianza in scala 43

4 Fasci di Lorentz **49**
4.1 Propagazione parassiale di un fascio di Lorentz 50
4.2 Fasci super-Lorentziani 56
4.3 Propagazione di un fascio super-Lorentziano 58
4.3.1 Una famiglia di fasci super-Lorentziani ortogonali . . . 62
4.3.2 Applicazioni 70

5 Ottica parassiale vettoriale **75**
5.1 Stati di polarizzazione a simmetria ellittica 75

6 Micro-spettroscopie Raman e SERS **83**
6.1 Interazione radiazione-materia 84
6.1.1 Effetto Raman 84
6.2 Apparato sperimentale 87
6.3 Sorgenti di rumore 90
6.4 Micro-spettroscopia Raman 91
6.5 SERS (*Surface-Enhanced Raman Scattering*) 92
6.6 Strumentazione, materiali e metodi 94
6.6.1 Apparato 94
6.6.2 Materiali e metodi 95
6.7 Risultati sperimentali 98
6.7.1 Adsorbimento di adenina 98
6.7.2 Adsorbimento di tirosina 103

Conclusioni **112**

A Trasformata di Fourier-Bessel **117**
A.1 Problemi di Sturm-Liouville 117
A.2 Rappresentazione spettrale 118
A.2.1 L'equazione di Bessel 119

B Teorema di Noether **123**

Pubblicazioni **125**

Capitolo 1

Propagazione e diffrazione in ottica

1.1 Il problema elettromagnetico

Un qualunque lavoro che intendesse analizzare le proprietà del campo elettromagnetico in una zona di spazio, aperta o no, in presenza di mezzi materiali di vario tipo, non potrebbe fare a meno di partire dalle ben note equazioni di Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}. \tag{1.1}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial_t \mathbf{D}. \tag{1.2}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho. \tag{1.3}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \tag{1.4}$$

(qui scritte nel S.I., con il consueto significato dei simboli), che svolgono il ruolo di equazioni del moto per il campo. A queste equazioni si aggiunge l'equazione di continuità, che esprime la conservazione della carica elettrica,

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \partial_t \rho = 0. \tag{1.5}$$

dove $\mathbf{J}$ è la densità di corrente e ρ è la densità di carica libera e non di polarizzazione. E' noto che le equazioni di Maxwell possono derivarsi interamente soltanto dalle equazioni dei rotori a cui si aggiunga l'equazione 1.5. A questo insieme di relazioni vanno poi aggiunte le relazioni costitutive del mezzo, che si possono porre nella forma

$$\mathbf{D} = f(\mathbf{E}). \tag{1.6}$$

$$\mathbf{B} = g(\mathbf{H}). \tag{1.7}$$

$$\mathbf{J} = h(\mathbf{E}). \tag{1.8}$$

dove le applicazioni indicate con $f(\cdot)$, $g(\cdot)$ e $h(\cdot)$ possono essere di vario tipo a seconda delle proprietà del materiale sede del fenomento elettromagnetico[1]. Esse sono essenziali per giungere a soluzione del cosiddetto problema elettromagnetico poichè le sole equazioni di Maxwell introducono un numero di incognite superiore al numero delle equazioni (6 equazioni e 15 incognite scalari): le restanti 9 relazioni sono fornite proprio dalle relazioni costitutive sopra indicate. Nel caso in cui vi siano presenti anche dei corpi di varia natura, a questo sistema di equazioni vanno aggiunte le condizioni al contorno per i campi sulle superfici di separazione tra i vari mezzi

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}^+ - \mathbf{D}^-) = \rho_S. \tag{1.9}$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}^+ - \mathbf{B}^-) = 0. \tag{1.10}$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}^+ - \mathbf{H}^-) = \mathbf{J_S}. \tag{1.11}$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}^+ - \mathbf{E}^-) = 0. \tag{1.12}$$

dove ρ_S e $\mathbf{J_S}$ sono le densità di carica e densità di corrente superficiali ed $\mathbf{n}$ la normale alla superficie, in generale funzione di punto. Lo svantaggio di una tale trattazione rigorosa è che raramente si riesce a pervenire a soluzioni in forma chiusa per il problema stesso, anche facendo delle drastiche idealizzazioni per le geometrie e i materiali coinvolti (per esempio piani infiniti, conduttori perfetti ecc.) e quindi spesso si ricorre a modelli di propagazione e diffrazione approssimati che trovano la loro legittimità nel buon accordo che si riscontra tra previsioni teoriche e risultati sperimentali.[2] Scopo della prossima sezione sarà per l'appunto il rivedere brevemente quali approssimazioni vengono adottate in ottica ed i limiti di applicabilità.

1.2 I modelli approssimati

Lo studio delle caratteristiche di propagazione nello spazio libero di campi luminosi, coerenti o parzialmente coerenti, è tradizionalmente condotto nell'ipotesi che lo stato di polarizzazione del campo sia uniforme su ciascun piano trasverso alla direzione di propagazione. Spesso poi si considerano campi

[1] La differente natura delle relazioni costitutive rispetto alle relazioni di Maxwell emerge da un'analisi geometrica della struttura dell'elettromagnetismo. Per approfondimenti si veda in [1]-[2]

[2] Un caso molto interessante, in cui si riesce a pervenire a soluzione del problema generale, è quello della diffrazione da cilindro indefinito (conduttore o dielettrico) di onda piana polarizzata linearmente. A seconda della polarizzazione del campo incidente si ottengono andamenti differenti del campo diffratto, espresso però sempre in termini di funzioni Hankel. L'utilità di conoscere, in forma chiusa, la soluzione di questo problema di *scattering* è legato al cosiddetto metodo di Richmond [3]-[4] mediante il quale si riesce a modellizzare la diffrazione di oggetti planari di varia geometria pensandoli costituiti da un *array* di cilindri indefiniti. Inoltre, in molte applicazioni, questi allineamenti vengono effettivamente utilizzati come elementi costruttivi, invece di strutture continue piane o curve, per ridurre il peso e la resistenza al vento.

per i quali la distribuzione spaziale di energia è localizzata in prossimità di una direzione di propagazione media e si parla quindi di fasci luminosi. Infatti in tali ipotesi, soprattutto quella di spazio libero, che implica l'assenza di oggetti diffrattivi in vicinanza dei quali l'andamento del campo dipende fortemente dal tipo di polarizzazione del campo incidente, si può trascurare la natura vettoriale della radiazione e considerare, come rappresentativa del campo elettromagnetico, una singola quantità scalare, che di volta in volta potrà essere una qualsiasi tra le componenti scalari del campo elettrico $\mathbf{E}$ o magnetico $\mathbf{B}$. A questo modello ci si riferisce usualmente come *approssimazione scalare.*
Nel presente lavoro si avrà spesso a che fare con campi quasi monocromatici descritti dalla quantità scalare $U(x, y, z)$, che rappresenta il segnale analitico associato ad una generica componente di campo, che soddisfa l'equazione di Helmholtz

$$\nabla^2 U + k^2 U = 0. \tag{1.13}$$

dove $k = 2\pi/\lambda$ è il numero d'onda. L'equazione 1.13 deriva dalle equazioni di Maxwell 1.1 nell'ipotesi che il mezzo sede del fenomeno elettromagnetico sia omogeneo, isotropo, privo di cariche e correnti. Il problema della determinazione del campo U in genere si pone nei seguenti termini: è nota la distribuzione di campo (nelle sue componenti di ampiezza e fase) in corrispondenza di un certo piano (che da ora in poi per noi sarà sempre il piano $(x, y, z = 0^+)$), di un opportuno sistema di riferimento Cartesiano, e si vuole determinare la forma assunta dal campo in qualunque piano successivo (x, y, z), con $z > 0$. Quello appena descritto rappresenta il problema propagativo, che è diverso da quello di interazione il quale si pone invece l'obiettivo di determinare il campo emergente dal piano $(x, y, z = 0^+)$ una volta che esso sia investito da una radiazione proveniente dal semispazio (x, y, z) con $z < 0$, e che rappresenta spesso la questione più complessa da affrontare e alla quale si dà soluzione approssimata facendo uso del concetto di funzione di trasmissione dello schermo, definita come rapporto tra campo emergente dallo schermo e quello ivi incidente e supponendo che questa sia indipendente dal campo incidente [5]. Tralasciando il problema dell'interazione (che non è tra le finalità della presente ricerca), si entrerà maggiormente nel dettaglio sugli aspetti matematici della propagazione, in particolare della decomposizione in onde piane, essendo fondamentale per parte degli sviluppi che seguiranno.

1.2.1 Sviluppo in onde piane

Supponiamo di conoscere il campo $U(x, y, z)$ in corrispondenza del piano $(x, y, 0)$. Indichiamo tale campo come $U_0(x, y)$. Esso può essere visto come una funzione di due variabili e supporremo sempre possibile effettuare il

seguente sviluppo di Fourier

$$U_0(x,y) = \int\int_{\infty} A_0(p,q)e^{2\pi i(px+qy)}dpdq. \tag{1.14}$$

dove l'integrazione è effettuata su tutto il piano e vale $2\pi p = k_x$ e $2\pi q = k_y$, con k_x e k_y componenti del vettore d'onda nel piano trasverso (x,y), legati alla componente lungo z dalla relazione di separabilità

$$k^2 = (\frac{2\pi}{\lambda})^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \tag{1.15}$$

Lo sviluppo integrale 1.14 si chiama sviluppo in onde piane perchè il campo si pensa costituito da un numero infinito di onde piane componenti di diversa ampiezza, rappresentata dal termine $A_0(p,q)$, ed è molto utile poichè è ben noto quale sia l'effetto della propagazione su di una singola onda piana componente. Infatti, una volta sia nota la forma del campo in termini di onde piane, il che vuol dire conoscere la forma della grandezza $A_0(p,q)$, si può dare la forma del campo sul generico piano $z \neq 0$ come

$$U(x,y,z) = \int\int_{\infty} A_0(p,q)e^{2\pi i(px+qy+mz)}dpdq. \tag{1.16}$$

dove $2\pi m = k_z$. Alle variabili p e q si dà il nome di frequenze spaziali (coniugate delle variabili spaziali x e y) e a $A_z(p,q) = A_0(p,q)e^{(2\pi imz)}$ quello di spettro angolare del campo. Poichè l'integrazione è estesa su tutto il piano, ne segue che esistono valori di p e q per i quali il valore di k_z diviene immaginario puro, in particolare si ha $m = (\frac{1}{\lambda^2} - p^2 - q^2)^{1/2}$ quando $p^2+q^2 \leq \frac{1}{\lambda^2}$ e $m = i(-\frac{1}{\lambda^2} + p^2 + q^2)^{1/2}$ quando $p^2 + q^2 > \frac{1}{\lambda^2}$. Dunque il campo si può scrivere come

$$\begin{aligned} U(x,y,z) &= \int\int_{[p^2+q^2\leq(\frac{1}{\lambda})^2]} A_0(p,q)e^{[2\pi i(px+qy+mz)]}dpdq \\ &+ \int\int_{[p^2+q^2>(\frac{1}{\lambda})^2]} A_0(p,q)e^{-2\pi|m|z}e^{[2\pi i(px+qy)]}dpdq. \end{aligned} \tag{1.17}$$

Al primo dei due integrali si dà il nome di parte omogenea del campo mentre al secondo parte inomogenea o evanescente. Come si vede, al crescere di z, il contributo delle onde evanescenti diviene sempre minore e diventa praticamente trascurabile già a distanze, lungo z, di poche lunghezze d'onda. Poichè il campo $U(x,y,z)$ e lo spettro $A_z(p,q)$ sono legati da una trasformazione di Fourier, vale anche

$$A_z(p,q) = \int\int_{\infty} U(x,y,z)e^{[-2\pi i(px+qy)]}dxdy. \tag{1.18}$$

Le difficoltà associate alla applicabilità di tale sviluppo in pratica risiedono nella frequente incapacità di pervenire a soluzione analitica, per il campo

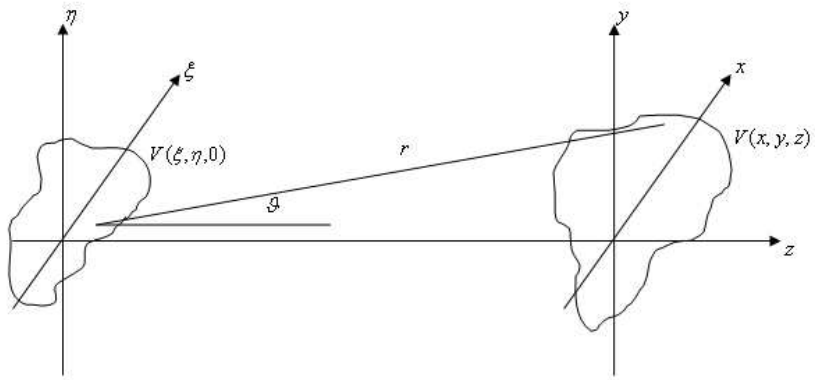

Figura 1.1: Piano sorgente e piano di ricostruzione

$U(x, y, z)$, mediante la trasformazione inversa 1.17. Ciò spesso non si sa fare e, come si vedrà, si rendono necessarie delle ipotesi semplificatrici aggiuntive. E' opportuno ricordare che il processo di propagazione così descritto è quello tipico dei sistemi lineari stazionari. Infatti si può porre

$$\begin{aligned} U(x,y,z) &= \int\int_{\infty} U_0(\xi,\eta)d\xi d\eta \int\int_{\infty} e^{2\pi i[p(x-\xi)+q(y-\eta)+mz]}dpdq \\ &= \int\int_{\infty} U_0(\xi,\eta)K_z(x-\xi,y-\eta)d\xi d\eta. \end{aligned} \tag{1.19}$$

dove si è introdotto il propagatore

$$K_z(x-\xi,y-\eta) = \int\int_{\infty} e^{2\pi i[p(x-\xi)+q(y-\eta)+mz]}dpdq. \tag{1.20}$$

Dalla 1.19 si vede che il propagatore ha il ruolo di risposta impulsiva di un sistema lineare invariante per traslazione. La sua trasformata di Fourier, pari a $e^{(2\pi imz)}$, rappresenta allora la funzione di trasferimento per il sistema in esame ed equivale ad un puro sfasamento per la parte omogenea del campo ed a una attenuazione esponenziale per la parte evanescente. In definitiva la propagazione libera agisce come un filtro passa basso per il campo, sfasando una parte delle onde piane componenti (parte omogenea) e attenuandone un'altra (parte inomogenea). Lo sviluppo in onde piane componenti fornisce quindi un procedimento per ricostruire la forma di un campo, noto su di un piano di partenza, dopo che si sia propagato liberamente fino ad una distanza generica dal piano sorgente. E' ben nota l'esistenza di un altro procedimento simile, il principio di Huygens-Fresnel, che si può legare a quanto visto fino ad ora nel seguente modo. Innanzitutto si può esprimere il propagatore 1.20 in termini di un'onda sferica come segue (vedi figura 1.1)

$$\frac{e^{ikr}}{r} = i\int\int_{\infty} e^{2\pi i[p(x-\xi)+q(y-\eta)+mz]}\frac{dpdq}{m}. \tag{1.21}$$

dove $r = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + z^2}$. Derivando la 1.21 rispetto a z si ottiene

$$\begin{aligned} K_z(x-\xi, y-\eta) &= -\frac{1}{2\pi}\partial_z\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right) \\ &= -\frac{1}{2\pi}\frac{d}{dr}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)\partial_z r \\ &= -\frac{1}{2\pi}\left(ik - \frac{1}{r}\right)\frac{e^{ikr}}{r}\cos\theta. \end{aligned} \tag{1.22}$$

che una volta inserita nella 1.19 dà la I formula di Rayleigh-Sommerfeld

$$U(x,y,z) = -\frac{1}{2\pi}\int\int_{\infty} U_0(\xi,\eta)\partial_z\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)d\xi d\eta. \tag{1.23}$$

Se la distanza z è tale che accade $k >> \frac{1}{r}$, allora vale la seguente relazione approssimata

$$U(x,y,z) = -\frac{i}{\lambda}\int\int_{\infty} U_0(\xi,\eta)\frac{e^{ikr}}{r}\cos\theta d\xi d\eta. \tag{1.24}$$

che si può per l'appunto interpretare come la formulazione matematica del celebre principio di Huygens-Fresnel, in cui ogni elemento infinitesimo di area $d\xi d\eta$, centrato sul punto (ξ,η), emette un'onda sferica di ampiezza proporzionale al campo $U_0(\xi,\eta)$ (anisotropa, a causa della presenza del termine $\cos\theta$ nel nucleo integrale, termine che in ogni caso è lecito trascurare se la sorgente non è troppo estesa e se z è sufficientemente grande), che si propaga indipendentemente da tutte le altre onde sferiche emergenti, la ricomposizione delle quali, sui piani successivi, permette di ricostruire il campo propagato. Dalla 1.23 si ha anche

$$U(x,y,z) = \frac{1}{2\pi}\int\int_{\infty}\left(\partial_z U(\xi,\eta,z)\right)_{z=0}\frac{e^{ikr}}{r}d\xi d\eta. \tag{1.25}$$

nota come seconda formula di Rayleigh-Sommerfeld che si può combinare con la prima formula per dare

$$U(x,y,z) = -\frac{1}{4\pi}\int\int_{\infty}\left[U_0(\xi,\eta)\partial_z\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right) - \left(\partial_z U(\xi,\eta,z)\right)_{z=0}\frac{e^{ikr}}{r}\right]d\xi d\eta. \tag{1.26}$$

detta relazione di Helmholtz-Kirchoff. Queste relazioni, in particolare la 1.26, esplicitano il ruolo fondamentale dell'onda sferica nel processo di costruzione del campo, poichè è evidente che il propagatore $K_z(x-\xi, y-\eta)$ non è altro che un'onda sferica; un risultato questo che non sorprende se si inquadra tutto il problema scalare nell'ambito della teoria della funzione di Green.

Data infatti l'equazione di Hemlholtz 1.13, la funzione di Green[3]è definita come quella funzione che soddisfa il problema non omogeneo

$$\nabla^2 G + k^2 G = -\delta(r). \tag{1.27}$$

con $\delta(r)$ distribuzione di Dirac. Si dimostra [13]-[14] che, per l'equazione di Helmholtz e per lo spazio libero, la funzione di Green assume la forma

$$G(r) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \tag{1.28}$$

e quindi la generica soluzione alla equazione di Helmholtz non omogenea (con funzione di eccitazione J)

$$\nabla^2 U + k^2 U = -J(r). \tag{1.29}$$

si scrive come

$$U(x,y,z) = \int_\tau GJ d\tau - \oint_S (U\partial_n G - G\partial_n U)\, dS. \tag{1.30}$$

dove τ è un volume generico di bordo superficiale S ed $\mathbf{n}$ indica la direzione normale (uscente) alla superficie S. La 1.30 conduce, nel caso in cui non vi siano termini di eccitazione, a

$$U(x,y,z) = -\oint_S (U\partial_n G - G\partial_n U)\, dS. \tag{1.31}$$

che si può interpretare come una regola per costruire il campo, nel punto di osservazione, come somma di onde elementari del tipo $G(r)$. E' altresì evidente che essa non rappresenta altro che la relazione di Helmholtz-Kirchhoff scritta per una superficie qualunque [15]-[16]. Infatti, nel caso in cui la superficie S degeneri in un piano (chiuso all'infinito), si ritrova proprio la 1.26. Dunque, in questo senso, il principio di Huygens-Fresnel rappresenta un caso particolare della teoria della funzione di Green, valido per lo spazio libero. Poichè la forma della funzione di Green dipende dalla equazione che la definisce così come dalle condizioni al contorno, è evidente che in altre situazioni (mezzi inomogenei o non lineari, presenza di corpi ecc.) ci si può aspettare che il principio di Huygens continui a valere, ma il ruolo dell'onda sferica sia sostituito dalla nuova (ammesso sempre che se ne sappia dare la forma esplicita) funzione di Green per il problema in esame. Tornando alla questione di riuscire a trovare una forma esplicita per il campo propagato $U(x,y,z)$, mediante la 1.17, nella prossima sezione vedremo le ulteriori ipotesi semplificatrici che usualmente si applicano, soffermandoci principalmente sulla approssimazione parassiale.

[3]Che altro non è che la funzione di risposta impulsiva per l'equazione in studio.

1.2.2 Approssimazione di Fresnel

Quando lo spettro angolare $A_0(p,q)$ del campo è differente da zero soltanto in un intorno dell'origine del piano di Fourier (p,q), il che vuol dire che le onde piane componenti il campo sono tutte poco inclinate rispetto all'asse z, che diviene quindi un asse medio di propagazione, si può dare la seguente forma approssimata al nucleo integrale presente nella I formula di Rayleigh-Sommerfeld

$$U(x,y,z) = -\frac{ie^{ikz}}{\lambda z}\int\int_{\infty} U_0(\xi,\eta)e^{i\frac{k}{2z}\left[(x-\xi)^2+(y-\eta)^2\right]}d\xi d\eta. \tag{1.32}$$

dove si è posto

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{z^2+(x-\xi)^2+(y-\eta)^2} = z\sqrt{\left[1+\frac{(x-\xi)^2+(y-\eta)^2}{z^2}\right]} \\ &\cong z+\frac{(x-\xi)^2+(y-\eta)^2}{2z} \end{aligned} \tag{1.33}$$

nell'argomento dell'esponenziale e $r \cong z$ a denominatore. Dagli sviluppi formali tale approssimazione risulta valida per valori si z tali che

$$z^3 >> \frac{\left[(x-\xi)^2+(y-\eta)^2\right]^2}{8\lambda}. \tag{1.34}$$

ma si può mostrare che già a distanze $z >> \frac{N^2\lambda}{2}$, con N numero positivo dell'ordine della decina, il campo propagato è ben descritto dalla 1.32.[4]Poichè sarà di utilità nel seguito, si riporta anche l'epressione dell'integrale di Fresnel in coordinate circolari-cilindriche

$$U(r,\theta,z) = -i\frac{e^{ikz}}{\lambda z}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} U(\rho,\varphi,0)e^{i\frac{k}{2z}\left[\rho^2+r^2-2r\rho\cos(\varphi-\theta)\right]}\rho d\rho d\varphi. \tag{1.35}$$

dove

$$\begin{cases} \xi = \rho\cos\varphi \\ \eta = \rho\sin\varphi \end{cases} \tag{1.36}$$

e

$$\begin{cases} x = r\cos\theta \\ y = r\sin\theta \end{cases} \tag{1.37}$$

Se si espande la funzione $U(\rho,\varphi,0)$ in serie di Fourier rispetto alla variabile φ

$$U(\rho,\varphi,0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n(\rho)e^{in\varphi}. \tag{1.38}$$

[4]Se si considerano valori di z ancora maggiori, ed in particolare tali che $z >> \frac{\xi^2+\eta^2}{2\lambda}$ allora nell'esponenziale presente nell'integrando della 1.32 si possono trascurare i termini quadratici in ξ e η, il che semplifica l'integrale di diffrazione conducendo alla cosiddetta approssimazione di Fraunhofer o di campo lontano

la 1.35 diviene

$$\begin{aligned}
U(r,\theta,z) &= -\frac{ie^{ikz}}{\lambda z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_0^{\infty}F_n(\rho)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}\rho d\rho \\
&\times \int_0^{2\pi}e^{in\varphi-i\frac{k\rho r}{z}\cos(\varphi-\theta)}d\varphi \\
&= -\frac{ie^{ikz}}{\lambda z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{in(\theta-\pi/2)}\int_0^{\infty}F_n(\rho)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}\rho d\rho \\
&\times \int_{-\theta+\pi/2}^{2\pi-\theta+\pi/2}e^{in\alpha-i\frac{k\rho r}{z}\sin\alpha}d\alpha \\
&= -\frac{ie^{ikz}}{\lambda z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{in(\theta-\pi/2)}\int_0^{\infty}F_n(\rho)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}\rho d\rho \\
&\times \int_0^{2\pi}e^{in\alpha-i\frac{k\rho r}{z}\sin\alpha}d\alpha \\
&= -\frac{ike^{ikz}}{z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{in(\theta-\pi/2)}\int_0^{\infty}F_n(\rho)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}J_n\left(\frac{k\rho r}{z}\right)\rho d\rho.
\end{aligned} \tag{1.39}$$

in cui si è fatto uso della rappresentazione integrale delle funzioni di Bessel [6]

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}e^{in\alpha-ix\sin\alpha}d\alpha \tag{1.40}$$

e si è fatta la sostituzione di variabile $\varphi-\theta=\alpha-\pi/2$. Nel caso in cui il campo $U(x,y,0)$ sia a simmetria assiale, la 1.39 si semplifica con l'espressione seguente

$$U(r,\theta,z) = -\frac{ike^{ikz}}{z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\int_0^{\infty}U(\rho,0)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}J_0\left(\frac{k\rho r}{z}\right)\rho d\rho. \tag{1.41}$$

La 1.41 può essere vista come un caso particolare di una trasformazione integrale, detta Trasformata di Fourier-Bessel, che nasce nell'ambito problemi di Sturm-Liouville e della loro risoluzione mediante il metodo della rappresentazione spettrale (il legame di cui si parla viene presentato nel dettaglio in appendice A, cui si rimanda per approfondimenti e riferimenti).

1.2.3 Equazione d'onda parassiale

Si può mostrare che il porsi nelle condizioni di Fresnel equivale ad ammettere che il campo si possa scrivere come il prodotto di due termini

$$U(x,y,z) = V(x,y,z)e^{ikz}. \tag{1.42}$$

con la funzione $V(x,y,z)$ che soddisfa la seguente equazione

$$\nabla_\perp^2 V(x,y,z) + 2ik\partial_z V(x,y,z) = 0. \tag{1.43}$$

detta equazione d'onda parassiale (scalare).[5]Infatti, se si sostituisce la 1.42 nella 1.13 si ottiene la seguente equazione

$$\nabla_\perp^2 V(x,y,z) + 2ik\partial_z V(x,y,z) + \partial_z^2 V(x,y,z) = 0. \tag{1.44}$$

Se ora si assume che $V(x,y,z)$ vari in z ma in modo tale che valga sempre $|\partial_z^2 V(x,y,z)| << |2ik\partial_z V(x,y,z)|$,[6] si ottiene proprio la 1.43 . E' semplice verificare che un campo del tipo 1.42 soddisfa l'equazione integrale 1.32 (si veda in [5]-[17]) per cui l'approssimazione di Fresnel e l'equazione parassiale sono equivalenti. Nel prossimo capitolo, dopo aver introdotto le caratteristiche di alcune soluzioni particolari dell'equazione di Helmholtz scalare, i cosiddetti campi non-diffrangenti, si passerà ad analizzare le soluzioni dell'equazione parassiale, mettendone in risalto le caratteristiche di simmetria ed il legame con i suddetti campi non-diffrangenti. Tuttavia, prima si discuteranno i limiti del modello scalare parassiale, mettendo in risalto in quali casi deve essere abbandonato e quali correzioni ad esso sono possibili.

1.3 Oltre l'ottica parassiale scalare

Fin ad ora ci siamo concentrati principalmente sul problema scalare, trascurando del tutto la natura vettoriale della radiazione elettromagnetica. Quando si vuole invece tenere conto anche della polarizzazione del campo, si parla genericamente di ottica vettoriale. Si è già detto che il modello scalare funziona in tutti quei casi in cui il fenomeno elettromagnetico avviene nelle seguenti condizioni:

- ci si trovi sufficientemente lontano da oggetti diffrangenti, di modo da poter trascurare il diverso andamento del campo diffratto in funzione del campo incidente sull'ostacolo.

- lo stato di polarizzazione sia uniforme su qualunque piano ortogonale alla direzione di propagazione media (il che presuppone che si possa individuare una direzione di propagazione media, cosa che è possibile solo se il campo è un'onda piana oppure se si tratta di un fascio luminoso).

Se almeno una di queste condizioni non risulta soddisfatta, occorre necessariamente tenere conto della natura vettoriale della radiazione elettromagnetica. In particolare c'è oggi un forte interesse verso alcuni tipi di fasci, che presentano uno stato di polarizzazione che non è uniforme sul piano trasverso, in ragione di tutta una serie di possibili applicazioni esistenti per tali

[5] $\nabla_\perp^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$ è l'operatore di Laplace nel piano trasverso (x,y)

[6] La distribuzione di campo $V(x,y,z)$ è dunque poco dissimile da quella prodotta da una semplice onda piana che si propaghi lungo l'asse z.

campi. Alcuni autori hanno messo in risalto che, per esempio, un campo polarizzato radialmente (con le linee di campo che descrivano delle semirette uscenti dall'origine degli assi), se fatto transitare in un sistema ottico ad ampia apertura numerica, che produca una forte focalizzazione (si parla di campi altamente focalizzati), produce uno *spot size* notevolmente più piccolo (circa 0.16 λ^2) rispetto a quello prodotto dal medesimo sistema ottico ma con un campo polarizzato linearmente (circa 0.26 λ^2) [19], cosa importante per settori specifici come la litografia, la microscopia confocale oppure l'immagazzinamento di dati. In pratica, quando si raggiungono i limiti di queste forti focalizzazioni, il ruolo della polarizzazione diviene essenziale, la capacità di impacchettamento del campo mostrandosi fortemente dipendente da essa. Si può mostrare poi che in questi casi il campo trasverso presenta uno zero lungo l'asse di propagazione e, inoltre, nel fuoco compare anche una componente di campo elettrico longitudinale, piuttosto intensa, che trova invece interessanti applicazioni nei *tweezer* ottici, utilizzati di recente per la manipolazione di nanoparticelle; tale componente longitudinale trova anche un fruttuoso impiego nel confinamento ottico [8]-[9]-[10] e nell'accelerazione di particelle ad alte energie oppure nella misura di assorbimento dipolare da parte di singole molecole o anche nella microscopia di campo vicino ad alta risoluzione [11]. L'importanza dei suddetti stati di polarizzazione non convenzionali in microscopia (SNOM, microRaman) dipende invece dal fatto che il comportamento dei materiali è in genere dipendente dallo stato di polarizzazione del campo incidente (si pensi alle regole di selezione) sia per il modo in cui sono costruiti[7] sia per la struttura chimica [7]. Tra gli stati di polarizzazione più utilizzati è d'obbligo ricordare i campi a polarizzazione a simmetria circolare [18] (polarizzazione radiale, di cui si è già detto, e azimutale, in cui le linee di campo descrivono dei cerchi con centro giacente sull'asse ottico) e quella più generale dei campi spiralizzati (le cui linee di campo sono delle spirali) che, come caso particolare, includono anche le polarizzazioni radiali e azimutali. I campi spiralizzati si sono mostrati efficaci come base per descrivere quei fasci luminosi che possiedano dei vortici nel profilo di fase nonchè come modello per sorgenti laser di nuova generazione (come i *circular-circle-grating, surface emitting* lasers) [19]-[76]-[21].
Ovviamente se accade pure, come in molti dei casi sopra descritti, che il campo non sia più pensabile come una lenta modulazione di un'onda piana, l'approssimazione parassiale scalare non è più un buon modello di descrizione per il campo in gioco e se ne richiedono degli altri più aderenti alla realtà in studio. Se, da un lato, alcuni autori hanno cercato di estendere i risultati dell'ottica parassiale scalare al caso vettoriale [12] altri hanno affrontato il problema dell'introduzione dei termini di correzione non parassiali. A tal proposito, un metodo che permette di introdurre le correzioni non parassiali è il cosiddetto metodo di Lax [22] in cui si scrive la generica soluzione delle

[7] Se si tratta di campioni artificiali, ovviamente. Del resto questo è il caso più frequente.

equazioni di Maxwell (in regime monocromatico) nel modo seguente

$$\mathbf{E} = (\mathbf{F}_\perp + \mathbf{F}_z)e^{ikz}. \tag{1.45}$$

ed il problema elettromagnetico diviene

$$\nabla_\perp^2 \mathbf{F}_\perp + 2ik\partial_z \mathbf{F}_\perp = -\partial_z^2 \mathbf{F}_\perp. \tag{1.46}$$

$$\nabla_\perp \cdot \mathbf{F}_\perp + \partial_z F_z + ikF_z = 0. \tag{1.47}$$

A questo punto si cercano delle soluzioni per le equazioni di Maxwell mediante una serie di forma

$$\mathbf{F}_\perp = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{F}_\perp^{(2m)}. \tag{1.48}$$

$$F_z = \sum_{m=0}^{\infty} F_z^{(2m+1)}. \tag{1.49}$$

in cui $\mathbf{F}_\perp^{(0)}$, che è l'ordine più basso dello sviluppo, è proprio il contributo parassiale al campo. I termini successivi dello sviluppo sono le correzioni non parassiali che si ottengono secondo la procedura [23]-[24]

$$\mathbf{F}_\perp^{(2m)} = \left(\frac{i}{2k}\right)^m \sum_{p=1}^{m} b_p^{(m)} z^p \partial_z^{m+p} \mathbf{F}_\perp^{(0)}. \tag{1.50}$$

dove

$$b_p^{(m)} = \frac{(2m)!}{m(p-1)!(m-p)!(m+p)!}. \tag{1.51}$$

La cosa interessante è che, all'ordine zero, il campo è puramente trasverso ed il primo contributo longitudinale al campo totale , la $F_z^{(1)}$, non è in fase con esso. Da qui si vede che affrontare e risolvere il problema parassiale è in ogni caso ancora importante, perchè o già da solo descrive bene un fascio luminoso oppure rappresenta un modello di ordine zero da cui avviare una procedimento di raffinamento per passi successivi. Quindi si può dire che, se da un canto il superamento del limite parassiale è inevitabile se si vogliono trovare nuovi modelli descrittivi che siano di ausilio per le sempre più crescenti applicazioni sperimentali e tecnologiche (tra le quali si pone la spettroscopia Raman, che sarà trattata nel dettaglio più oltre), rimangono comunque molti aspetti ancora da indagare ed approfondire, come si spera di mettere sufficientemente in evidenza nelle sezioni a seguire.

Capitolo 2

Campi non diffrangenti e pseudo non diffrangenti

2.1 Soluzioni di campo a sezione invariante

Abbiamo visto nel capitolo precedente che, nell'ambito del modello scalare, il problema elettromagnetico si riduce a trovare una soluzione per l'equazione di Helmholtz scalare, che qui riscriviamo per comodità

$$\nabla^2 U + k^2 U = 0. \tag{2.1}$$

una volta che il campo U sia noto su di una superficie di partenza. Tra le possibili soluzioni per tale problema ne esistono alcune particolari, che hanno attirato l'attenzione della comunità scientifica da un po' di tempo, poichè esse apparentemente sembrano non risentire dell'effetto della diffrazione.[1] Infatti una proprietà tipica di tutti i fenomeni ondulatori è che, se si parte da una certa distribuzione di campo piuttosto localizzata, concentrata attorno ad un asse (per esempio l'asse z), in propagazione il campo tende a distribuirsi in maniera sempre più uniforme su tutto lo spazio mostrando sempre meno un qualunque effetto di localizzazione. In effetti la diffrazione è proprio quel fenomeno per il quale un campo, in qualche modo limitato in estensione spaziale, tende a distribuirsi su regioni di spazio sempre più grandi e tanto più velocemente quanto più spinto ne era stato il confinamento in partenza. I fasci non-diffrangenti invece non mostrano alcun cambiamento nel proprio profilo di intensità durante la propagazione,[2] a dispetto di quanto sopra detto (ma essi sono in ogni caso sempre distribuiti su regioni spaziali

[1] In effetti il primo lavoro sui campi non diffrangenti risale al 1987 ad opera di Durnin, Miceli e Eberly [25], anche se precedentemente, nel 1978, era stata già introdotta (Sheppard e Wilson [26]) una versione a modulazione Gaussiana dei fasci di Bessel riscoperta successivamente da Gori, Guattari e Padovani [27] sempre nel 1987.

[2] Da qui in avanti, salvo esplicito avviso contrario, con *profilo di intensità* ci si riferirà al profilo di intensità nel piano trasverso alla direzione media di propagazione.

infinite!). L'interesse specifico nei riguardi di un tale tipo di soluzioni non è solo teorico poichè possedere un campo luminoso con una profondità di fuoco virtuale infinita può essere importante nelle comunicazioni wireless, in microlitografia, in metrologia oppure in chirurgia, tanto per citare alcune tra le numerose possibili applicazioni. In effetti un esempio di campo non diffrangente è noto da tempo, trattandosi dell'onda piana, del tipo Ae^{ikz} per esempio, che mantiene la propria forma su qualunque piano, risentendo soltanto di una variazione di fase da un piano al successivo.[3] Solo più tardi si è messo in evidenza l'esistenza di una nuova famiglia di campi non diffrangenti, i fasci di Bessel, la cui espressione analitica, per un fascio con asse z come direzione media di propagazione, è pari a

$$U(x,y,z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n J_n(k_t r) e^{in\varphi} e^{ik_z z}. \tag{2.2}$$

con

$$k^2 = k_t^2 + k_z^2. \tag{2.3}$$

J_n funzione di Bessel di prima specie di ordine n e A_n coefficiente complesso. Le variabili circolari r e φ sono definite come al solito tali che $x = r\cos\varphi$ e $y = r\sin\varphi$. E' immediato constatare che il modulo di tale campo è indipendente da z, come deve essere per un campo che mantenga inalterato il proprio profilo in propagazione. La ragione per cui tali campi sono non-diffrangenti è legato al fatto che tutte le onde piane costituenti il fascio possiedono un medesimo valore della componente del vettore d'onda lungo z, ossia del k_z, il che permette di mantenere immutata la relazione di fase tra di esse. In questa maniera, su ogni piano, esse si ricompongono sempre allo stesso modo dando sempre lo stesso profilo di campo, che al più può variare solo per un termine di fase. Negli ultimi anni c'è stato un rinnovato interesse riguardo queste soluzioni a sezione invariante, interesse che ha portato da un lato alla introduzione di due nuove famiglie di *non-diffracting beams* e dall'altro a guardare al fenomeno sotto un differente punto di vista. Infatti abbiamo detto precedentemente che la condizione di non-diffrangenza si ottiene garantendo che la componente k_z del vettore d'onda di tutte le onde piane componenti sia fissata ad un unico valore. Questo implica che lo spettro angolare sia di tipo anulare, ovvero sia differente da zero solo su di un supporto circolare, nel piano di Fourier, di raggio pari a $k_t = \sqrt{k^2 - k_z^2}$. Infatti abbiamo visto nel capitolo precedente che un campo si può sempre porre nella forma

$$U(x,y,z) = \int\int_{\infty} A_0(k_x,k_y) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} dk_x dk_y. \tag{2.4}$$

[3]Le caratteristiche non diffrangenti dell'onda piana possono essere giustificate in modo euristico considerandola come un campo che abbia già subito completamente gli effetti della diffrazione e dunque che non possa allargarsi ulteriormente.

ovvero, in coordinate circolari cilindriche (k_t, ϕ)

$$U(x,y,z) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} A_0(k_t,\phi) e^{ik_z z} e^{ik_t(x\cos\phi + y\sin\phi)} k_t dk_t d\phi. \tag{2.5}$$

Bloccare il valore di k_z equivale a fissare anche il valore di k_t,[4] e quindi a richiedere per $A_0(k_t,\phi)$ una forma del tipo $A_0(k_t,\phi) = f(\phi)\delta(k_t - \bar{k_t})$. La 2.5 diviene dunque

$$U(x,y,z) = e^{ik_z z} \int_0^{2\pi} f(\phi) e^{i\bar{k_t}(x\cos\phi + y\sin\phi)} d\phi. \tag{2.6}$$

che è una forma semplificata dell'integrale di Whittaker [28]-[30]. Da qui si vede che i campi a sezione invariante sono in teoria infiniti, ciascuno legato ad una particolare forma della funzione angolare $f(\phi)$. A seconda della forma della funzione $f(\phi)$ si otterrà un differente *non-diffracting beam*. Per esempio, se $f(\phi) = \sum_m \delta(\phi - \phi_m)$ si ottengono m onde piane mentre se risulta $f(\phi) = e^{im\phi}$ si ottiene un fascio di Bessel di ordine m. Le due nuove famiglie di fasci non-diffrangenti cui si faceva cenno sopra, il cui spettro ovviamente ha sempre forma del tipo 2.6, sono state derivate nel seguente modo. Partendo dall'equazione di Helmholtz 2.1 si è osservato che essa è separabile in ben 11 sistemi di coordinate curvilinee ortogonali. Tra tutti questi 11 sistemi di coordinate, soltanto 4 sono sistemi a simmetria cilindrica: le coordinate Cartesiane, le coordinate circolari-cilindriche, le coordinate ellittico-cilindriche e le coordinate parabolico-cilindriche. Se indichiamo con (q_1, q_2, z) una generica terna di tali coordinate ortogonali, possiamo dire che un campo sarà a sezione invariante se si potrà porre nella forma

$$U(q_1,q_2,z) = V(q_1,q_2)e^{ik_z z}. \tag{2.7}$$

Prendendo ora tale forma e inserendola nell'equazione di Helmholtz si ha

$$\nabla_\perp^2|_{q_1,q_2} V(q_1,q_2) + k_t^2 V(q_1,q_2) = 0. \tag{2.8}$$

dove $\nabla_\perp^2|_{q_1,q_2}$ è il Laplaciano trasverso espresso nel sistema di cooordinate ortogonale generico. A questo punto si va alla ricerca delle soluzioni che siano fattorizzate nelle due variabili trasverse, cioè del tipo

$$V(q_1,q_2) = Q_1(q_1)Q_2(q_2). \tag{2.9}$$

il che conduce ad una coppia di equazioni differenziali nelle singole coordinate q_1 e q_2. Se si sceglie $q_1 = x$ e $q_2 = y$, secondo questo procedimento, si ottengono le onde piane, una soluzione ben nota dell'equazione di Helmholtz. Se si ha invece $q_1 = r$ e $q_2 = \varphi$, si ottengono i fasci di Bessel. Se si pone $q_1 = \xi$

[4] Essi sono infatti legati dalla relazione di separabilità 2.3

e $q_2 = \eta$, con ξ e η coordinate ellittico-cilindriche, legate alle coordinate cartesiane dalle relazioni

$$\begin{cases} x = h \cosh \xi \cos \eta. \\ y = h \sinh \xi \sin \eta. \end{cases} \tag{2.10}$$

con $2h$ pari alla distanza interfocale, l'equazione di Helmholtz si separa nella coppia di equazioni di Mathieu, angolare e radiale, la cui soluzione fornisce la famiglia di fasci di Mathieu [29]-[30]. Allo stesso modo, la quarta ed ultima famiglia di campi non-diffrangenti derivabili secondo questa procedura nasce ponendo ora $q_1 = \xi$ e $q_2 = \eta$, con ξ e η coordinate parabolico-cilindriche, legate alle coordinate Cartesiane dalle relazioni

$$\begin{cases} x = \frac{\eta^2 - \xi^2}{2} \\ y = \eta\xi \end{cases} \tag{2.11}$$

In questo caso l'equazione di Helmholtz si trasforma in una coppia di equazioni differenziali parabolico-cilindriche e produce i cosiddetti fasci parabolico-cilindrici [31]. Con questa ultima famiglia di campi si conclude la classe di campi a sezione invariante attualmente noti.
Fin qui ci si è limitati a descrivere delle soluzioni per l'equazione di Helmholtz con peculiari caratteristiche non-diffrangenti, sorvolando sulla loro realizzabilità in laboratorio. In effetti tutti tali campi possiedono un'estensione spaziale infinita e una norma non finita, cosa che non è decisamente realizzabile in pratica, per cui si rende necessaria l'introduzione di una qualche funzione modulante, che ne limiti l'estensione spaziale e renda l'energia del campo finita. L'introduzione di un inviluppo altera certamente le caratteristiche in propagazione (infatti lo spettro perde la sua caratteristica struttura anulare) e pone il quesito di quale sia la più opportuna funzione modulante da introdurre. Inoltre, il nuovo campo, ottenuto moltiplicando uno dei fasci non-diffrangenti per tale funzione di inviluppo, rimane soluzione dell'equazione di Helmholtz? A questo e altro è dedicata la prossima sezione.

2.2 Campi pseudo non-diffrangenti

Si è detto che, per poter realizzare un fascio a sezione invariante in laboratorio, occorre dotare il campo ottico di un inviluppo che ne regoli l'estensione spaziale a seconda delle proprie necessità. Ovviamente le varie funzioni di finestratura sono praticamente infinite, anche se alcune di esse hanno suscitato maggiore attenzione rispetto ad altre. In particolare un ruolo importante ha rivestito la funzione di inviluppo Gaussiano e su questa ci soffermeremo in dettaglio. Storicamente il primo tipo di campi non-diffrangenti con apertura finita studiati sono stati i fasci di Bessel-Gauss. In particolare, se $J_0(k_t r)$

indica la funzione di Bessel di prima specie di ordine zero, si ha, sul piano di partenza

$$BG(x,y,0) = J_0(k_t r)e^{-\frac{r^2}{w_0^2}}. \tag{2.12}$$

dove il parametro w_0 misura la larghezza dell'inviluppo Gaussiano e $r = \sqrt{x^2+y^2}$. Mentre non si conosce una soluzione analitica dell'equazione di Helmholtz scalare che produca, su di un dato piano, una tale distribuzione di campo, si riesce però a descrivere la propagazione della 2.12 in approssimazione di Fresnel mediante il relativo integrale di diffrazione 1.41, che ora diviene

$$BG(r,\theta,z) = -\frac{ike^{ikz}}{z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}\int_0^\infty BG(\rho,0)e^{i\frac{k}{2z}\rho^2}J_0\left(\frac{k\rho r}{z}\right)\rho d\rho. \tag{2.13}$$

Se indichiamo con I_0 la funzione di Bessel modificata di ordine zero, si può sfruttare la seguente proprietà integrale [32]

$$\int_0^\infty e^{-cx}J_0(2\gamma\sqrt{x})J_0(2\delta\sqrt{x})dx = \frac{1}{c}I_0(\frac{2\gamma\delta}{c})e^{\left[-(\gamma^2+\delta^2)/c\right]}. \tag{2.14}$$

per mezzo della quale si riesce a dare una soluzione in forma chiusa all'integrale 2.13, che fornisce il campo cercato

$$\begin{aligned} BG(r,\theta,z) &= \frac{1}{1+iz/L}e^{\left[-\frac{r^2}{w_0^2}\frac{1}{(1+iz/L)}\right]}J_0\left(\frac{k_t r}{1+iz/L}\right) \\ &\times\ e^{\left[-i\frac{k_t^2}{2k}\frac{z}{(1+iz/L)}\right]}e^{ikz} \end{aligned} \tag{2.15}$$

dove si è fatto uso della identità $I_0(x) = J_0(ix)$.[5] Il parametro L vale $kw_0^2/2$ ed è identico alla distanza di Rayleigh di un fascio Gaussiano semplice. Dal punto di vista del comportamento in propagazione, questi campi si mantengono essenzialmente invariati soltanto su una distanza finita di propagazione (di qui il nome di campi pseudo non-diffrangenti), al di sotto della quale emulano piuttosto bene un andamento *diffraction-free*. Quindi, riepilogando quanto fatto, possiamo dire che partendo dai fasci di Bessel (soluzioni non-diffrangenti dell'equazione di Helmholtz), e dotandoli di un inviluppo

[5] Abbiamo già detto che se si scrive il vettore d'onda per la generica onda piana componente il campo complessivo come $\mathbf{k} = \mathbf{k_t} + \hat{z}k_z$, risulta $k^2 = k_t^2 + k_z^2$. Questa relazione di separabilità, se graficata nel piano (k_t, k_z), rappresenta una circonferenza con centro nell'origine degli assi e raggio pari a k (con k valore costante). Il modello parassiale di propagazione del campo suppone $k_t << k_z$, il che equivale a considerare solo onde piane con vettori d'onda il cui estremo libero si muova lungo la circonferenza suddetta in un intorno simmetrico del punto $(0,k)$. In tale intorno non si commette allora un grande errore se si confonde il tratto di circonferenza con quello di una parabola di equazione $k_z = k - \frac{k_t^2}{2k}$, relazione su cui si tornerà in seguito, e che rappresenta proprio il legame tra le ampiezze dei vettori d'onda nel limite parassiale.

Gaussiano, si perviene ad un nuovo tipo di campi che sono soluzione analitica del problema di diffrazione nell'approssimazione di Fresnel e, dunque, a meno del termine e^{ikz}, possiamo anche dire che essi soddisfano l'equazione parassiale 1.43. Si tratta di un interessante legame tra le soluzioni delle due differenti equazioni differenziali che cercheremo di investigare più approfonditamente. Infatti una volta introdotti i campi di Bessel-Gauss risulta evidente l'esistenza di una strana asimmetria nella classe di soluzioni dell'equazione parassiale; ciò perchè, come visto nel precedente capitolo, ad oggi sono note quattro famiglie di soluzioni non-diffrangenti: le onde piane, i fasci di Bessel, i fasci di Mathieu ed i fasci parabolico-cilndrici. Visto che sia i fasci Gaussiani puri e che i fasci di Bessel-Gauss si possono pensare come quelle soluzioni parassiali nate dalla modulazione, rispettivamente di un'onda piana e di un fascio di Bessel, con un termine Gaussiano, è naturale chiedersi se esista una tale corrispondenza anche per le rimanenti due famiglie di fasci non-diffrangenti di cui si è già avuto modo di parlare precedentemente. E' pure evidente, però, che per essi tentare di dimostrare l'esistenza della loro versione a modulazione Gaussiana per mezzo degli integrali di diffrazione di Fresnel sembra proibitivo, trovandosi di fronte a integrali la cui risoluzione è tutt'altro che banale. Inoltre, ammesso che si riesca anche a trovare la soluzione in forma chiusa per gli integrali di diffrazione, rimane la sensazione di aver risolto il singolo problema, ma non di aver colto appieno l'essenza del fenomeno. E' con tali finalità che quindi si è cercato di investigare questo apparente ruolo privilegiato ricoperto dalla funzione Gaussiana nell'ambito dell'ottica di Fresnel, cosa che verrà illustrata nel prossimo capitolo.

Capitolo 3

Simmetrie in ottica parassiale

Cominciamo con il considerare l'equazione parassiale tridimensionale, che riscriviamo qui per comodità:

$$\nabla_{\perp}^{2} u(x, y, z) + 2iku_z(x, y, z) = 0. \tag{3.1}$$

dove abbiamo utilizzato la notazione u_z per indicare la derivazione parziale, per certi versi più conveniente per alcuni degli sviluppi che seguiranno; alla luce di quanto detto nel paragrafo precedente, vogliamo studiare le caratteristiche di simmetria di tale equazione ed in particolare mostrare che essa ammette una classe di soluzioni che sono modulate da un inviluppo Gaussiano bidimensionale. Per raggiungere questo scopo utilizzeremo una bellissima teoria, dovuta al matematico Sophus Lie, che permette di analizzare le proprietà di un generico sistema di equazioni differenziali ricercando i gruppi di simmetria associati al sistema stesso. Tale teoria è stata utilizzata fruttuosamente, per esempio, da Wünche [39] per mostrare che i fasci di Hermite-Gauss e Laguerre-Gauss[1] (di argomento complesso) possono essere ottenuti a partire dal fascio Gaussiano applicando ad esso le potenze di certi operatori differenziali di Lie e da Simon e Mukunda per descrivere in un modo universale la propagazione di campi *shape invariant* coerenti o parzialmente coerenti [40]. Nella prossima sezione si vedranno i fondamenti della teoria e se ne darà applicazione all'equazione 3.1, limitandoci tuttavia a fornirne una descrizione minimale, piuttosto orientata a raggiungere gli obiettivi dichiarati, rimandando, per approfondimenti, alla numerosa letteratura esistente al riguardo.

[1] Entrambi questi tipi di campi sono soluzione dell'equazione parassiale 3.1, i primi a simmetria Cartesiana e i secondi a simmetria circolare-cilindrica. Rappresentano, assieme ai fasci di Ince-Gauss, che sono le soluzioni a simmetria ellittico-cilindrica, le famiglie complete di soluzioni ortogonali dell'ottica parassiale.

3.1 Teoria dei gruppi di Lie

La teoria dei gruppi di Lie mescola sapientemente due teorie: la teoria dei gruppi e quella delle varietà differenziali. Un gruppo G è un insieme di elementi con una legge di composizione m tra gli elementi, che soddisfa le seguenti proprietà:

- **Proprietà di chiusura**:
  Per ogni elemento a e $b \in G$, $m(a, b)$ è ancora un elemento dell'insieme.

- **Proprietà associativa**:
  Per ogni elemento a, b e c dell'insieme vale:
  $m(a, m(b, c)) = m(m(a, b), c)$.

- **Esistenza elemento neutro**
  Esiste un elemento neutro $e \in G$ tale che, per ogni elemento $a \in G$:
  $m(a, e) = m(e, a) = a$.

- **Esistenza elemento simmetrico o inverso**
  Ogni elemento $a \in G$ possiede un elemento a^{-1} tale che
  $m(a, a^{-1}) = m(a^{-1}, a) = e$.

Se il gruppo è anche commutativo o Abeliano vale anche

- **Proprietà commutativa**
  Per ogni coppia di elementi appartenenti all'insieme risulta:
  $m(a, b) = m(b, a)$

Seguendo Burke [33] possiamo invece dire che una varietà (o *manifold*) è un insieme *well-behaved* dotato di sufficiente struttura da poter permettere di fare del calcolo, inteso come la tecnica delle approssimazioni lineari che nasce dal comportamento locale di una funzione sufficientemente liscia[2]. Per aggiungere una struttura ad una varietà occorre poter mappare una regione aperta della varietà, centrata attorno ad un punto della varietà stessa, su di una regione aperta dello spazio euclideo $\Re^n$ e richiedere che tale mappa sia un omeomorfismo[3]. In questo modo ci si assicura che la rappresentazione fatta su $\Re^n$, mediante tale mappa, rispetti la topologia della varietà. Volendo formalizzare il tutto, possiamo dire che, se la varietà è $M \subset \Re^N$ e la sua rappresentazione è $V \subset \Re^n$, la mappa $\Phi : V \to M$ che le lega si può scrivere

[2] Con i termini *well-behaved* e/o *lisci*, si intende, come oramai d'uso, insiemi con derivate continue fino all'ordine necessario.

[3] Ovvero che sia la mappa che la sua inversa siano continue.

come

$$\begin{aligned} y^1 &= \Phi^1(x^1, \ldots, x^n) \\ &\vdots \\ y^N &= \Phi^N(x^1, \ldots, x^n) \end{aligned} \tag{3.2}$$

dove le variabili x^i coprono V e le y^i l'immagine su M. Se si richiede che la Φ sia una mappa *liscia* allora devono esistere le derivate parziali di qualunque ordine. Questo non è però sufficiente, ma bisogna richiedere anche che la matrice Jacobiana

$$\left[\frac{\partial \Phi^i}{\partial x^j}\right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi^1}{\partial x^1} & \cdots & \frac{\partial \Phi^1}{\partial x^n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial \Phi^N}{\partial x^1} & \cdots & \frac{\partial \Phi^N}{\partial x^n} \end{bmatrix}. \tag{3.3}$$

sia regolare in ogni punto della varietà M, il che si traduce nel richiedere che essa abbia rango massimo n.[4] Ciò significa che gli n vettori colonna, in cui la 3.3 può pensarsi composta, siano linearmente indipendenti[5] [35]. Una volta introdotti i concetti di gruppo e di varietà possiamo dire che un gruppo di Lie ad r-parametri è un gruppo G che porta la struttura di una varietà r-dimensionale, in modo tale che entrambe le operazioni di gruppo

$$m : G \times G \to G, \quad m(g,h) = g \cdot h, \quad g, h \in G. \tag{3.4}$$

$$i : G \to G, \quad i(g) = g^{-1}, \quad g \in G. \tag{3.5}$$

siano mappe *lisce* tra varietà. Di fondamentale importanza è poi il concetto di trasformazioni agenti su di una varietà, definite come segue:

Definizione:
Un gruppo di trasformazioni agenti su di una varietà M è determinato da un gruppo di Lie G, definito su di un sottoinsieme aperto U tale che $\{e\} \times M \subset U \subset G \times M$, e da una mappa liscia $\Psi : U \to M$ che soddisfa le seguenti proprietà:

1. *Se $(h,x) \in U$, $(g, \Psi(h,x)) \in U$ e $(g \cdot h, x) \in U$, allora*

$$\Psi(g, \Psi(h,x)) = \Psi(g \cdot h, x). \tag{3.6}$$

2. *$\forall x \in M$*

$$\Psi(e,x) = x. \tag{3.7}$$

3. *Se $(g,x) \in U$, allora $(g^{-1}, \Psi(g,x)) \in U$ e*

$$\Psi(g^{-1}, \Psi(g,x)) = x. \tag{3.8}$$

[4] Nella 3.3 si è supposto $N \geq n$, con n dimensione del *manifold* liscio $M \subset \Re^N$.
[5] e quindi su di essi può costruirsi uno spazio vettoriale.

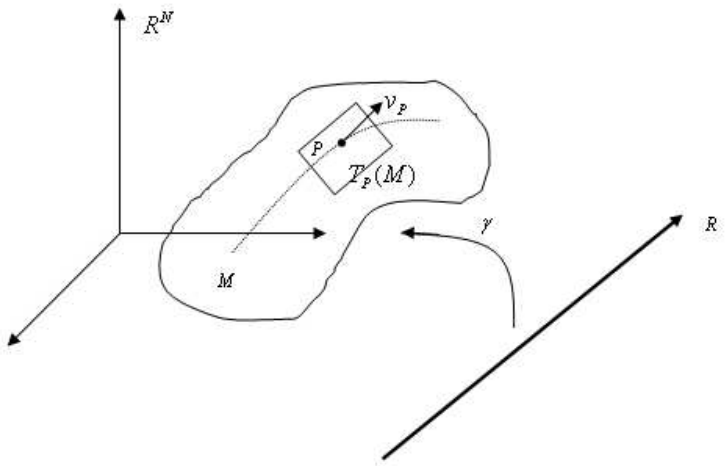

Figura 3.1: Varietà, spazio tangente e curva integrale

In particolare, nel contesto dello studio delle simmetrie nei sistemi di equazioni differenziali, si fa uso dei gruppi locali di trasformazioni per i quali, per un dato $x \in M$, la trasformazione $\Psi(g, x)$ è definita soltanto per gli elementi g del gruppo in prossimità dell'identità [36]-[35]-[38].

3.1.1 Spazi tangenti

Il legame tra i gruppi e le varietà si realizza mediante il concetto di spazio tangente, che rappresenta uno dei concetti centrali nel calcolo delle varietà, inteso come comportamento locale di una famiglia di curve. In particolare consideriamo sempre la varietà $M \subset \Re^N$ e sia P un punto su di essa. Se si indica con $\gamma(\epsilon) : \Re \to M$ una curva liscia che passi per il punto P,[6] possiamo considerare il vettore, detto vettore tangente a γ in P, così generato:

$$\mathbf{v}_P = \frac{d\gamma}{d\epsilon}_{|\epsilon=0}. \tag{3.9}$$

L'insieme dei vettori generati, secondo la 3.9, da tutte le possibili curve in M, che attraversano P, forma lo spazio tangente ad M in P, usualmente indicato con $\mathbf{T}_P(M)$ (vedi figura 3.1). Per investigare la struttura di questo spazio tangente, introduciamo un sistema di coordinate (V, Φ) che ricopre un intorno di P. In particolare scegliamo un sistema di coordinate tale che il punto P abbia coordinate $(0, \ldots, 0)$. In questo sistema di coordinate, γ ha la seguente rappresentazione:

$$\gamma(\epsilon) = (x^1(\epsilon), \ldots, x^n(\epsilon)). \tag{3.10}$$

[6] La parametrizzazione su γ è scelta in modo che accada $\gamma(0) \equiv P$.

con $x^j(0) = 0$, $j = 1, \ldots, n$. Su M invece essa avrà forma

$$\gamma(\epsilon) = \begin{bmatrix} \Phi^1(x^1(\epsilon), \ldots, x^n(\epsilon)) \\ \vdots \\ \Phi^N(x^1(\epsilon), \ldots, x^n(\epsilon)) \end{bmatrix}. \tag{3.11}$$

che dopo derivazione dà

$$\mathbf{v}_P = \frac{d\gamma}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi^1}{\partial x^1} \frac{dx^1}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} + \ldots + \frac{\partial \Phi^1}{\partial x^n} \frac{dx^n}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} \\ \vdots \\ \frac{\partial \Phi^N}{\partial x^1} \frac{dx^1}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} + \ldots + \frac{\partial \Phi^N}{\partial x^n} \frac{dx^n}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} \end{bmatrix}. \tag{3.12}$$

Nella 3.12 riconosciamo i vettori colonna, linearmente indipendenti per ipotesi, già incontrati nell'espressione dello Jacobiano 3.3, che quindi costituiscono una base per lo spazio $\mathbf{T}_P(M)$. In conseguenza di ciò possiamo scrivere la 3.12 come

$$\mathbf{v}_P = \frac{d\gamma}{d\epsilon}_{|\epsilon=0} = \frac{dx^1}{d\epsilon}_{|\epsilon=0} \mathbf{e_1} + \ldots + \frac{dx^n}{d\epsilon}_{|\epsilon=0} \mathbf{e_n}. \tag{3.13}$$

avendo definito il generico vettore del sistema di riferimento come

$$\mathbf{e_i} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi^1}{\partial x^i} \\ \vdots \\ \frac{\partial \Phi^N}{\partial x^i} \end{bmatrix}_{|(0,\ldots,0)}. \tag{3.14}$$

con $i = 1, \ldots, n$. Poichè i vettori linearmente indipendenti sono n, ne segue che lo spazio tangente $\mathbf{T}_P(M)$ è uno spazio n-dimensionale. Se ora consideriamo punti differenti sullo stesso *manifold* otterremo in generale spazi tangenti differenti, contrariamente a quanto avviene invece in uno spazio affine nei quali tutti i punti sono equivalenti tra loro. In particolare, se pensiamo di posizionare un vettore tangente in ogni punto di M, otteniamo un campo vettoriale le cui componenti sono funzione di punto:

$$\mathbf{v} = \xi^1(x^1, \ldots, x^n)\partial_{x^1} + \xi^2(x^1, \ldots, x^n)\partial_{x^2} + \ldots + \xi^n(x^1, \ldots, x^n)\partial_{x^n}. \tag{3.15}$$

I campi vettoriali sono importanti poichè essi generano un gruppo di trasformazioni su di una varietà M. Definita infatti una curva parametrizzata $s : \Re \to M$, detta *curva integrale* del campo $\mathbf{v}$, tale che il vettore tangente alla curva in ogni punto coincida con il campo $\mathbf{v}$, per la sua parametrizzazione 3.10 si ha

$$\frac{dx^i}{d\epsilon} = \xi^i(x^1, \ldots, x^n). \tag{3.16}$$

$i = 1, \ldots, n$. La 3.16 può essere vista come un sistema di equazioni differenziali che, per i teoremi di esistenza ed unicità, ci assicura l'esistenza di una curva di estensione massima, che indichiamo con $\Psi(\epsilon, \mathbf{x})$ e a cui ci si riferisce

con il termine di *flusso* generato dal campo $\mathbf{v}$,[7] che si può mostrare rispetta le proprietà di un gruppo di trasformazioni 3.6, 3.7, 3.8. Il campo vettoriale generatore del flusso è quindi ad esso legato dalla relazione

$$\mathbf{v}|_x = \frac{d\Psi(\epsilon, \mathbf{x})}{d\epsilon}. \tag{3.17}$$

Formalmente si può esprimere il flusso $\Psi(\epsilon, \mathbf{x})$ in termini di $\mathbf{v}$ mediante la cosiddetta *esponenziazione*

$$\Psi(\epsilon, \mathbf{x}) = e^{\epsilon \mathbf{v}}(\mathbf{x}). \tag{3.18}$$

per cui valgono

$$\begin{aligned} e^{(\delta+\epsilon)\mathbf{v}}(\mathbf{x}) &= e^{\delta \mathbf{v}} e^{\epsilon \mathbf{v}}(\mathbf{x}) \\ e^{0\mathbf{v}}(\mathbf{x}) &= \mathbf{x} \\ \frac{d}{d\epsilon} e^{\epsilon \mathbf{v}}(\mathbf{x}) &= \mathbf{v}_{|e^{\epsilon \mathbf{v}}(\mathbf{x})}. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Il fatto che $\mathbf{v}$ sia il generatore di Ψ si può mostrare effettuando uno sviluppo di Taylor della $\Psi(\epsilon, \mathbf{x})$

$$\Psi(\epsilon, \mathbf{x}) = \mathbf{x} + \epsilon \xi(\mathbf{x}) + O(\epsilon^2). \tag{3.20}$$

in cui si vede che localmente (ovvero al primo ordine) la $\Psi(\epsilon, \mathbf{x})$ differisce dall'identità proprio per un termine che dipende dalle componenti $\xi(\mathbf{x}) = (\xi^1(\mathbf{x}), \ldots, \xi^n(\mathbf{x}))$ di $\mathbf{v}$. Dunque, volendo riepilogare quanto fino ad adesso visto, possiamo dire che il flusso $\Psi(\epsilon, \mathbf{x})$ si comporta come un gruppo di trasformazioni locali sulla varietà M e che esso è noto una volta che sia noto il campo vettoriale $\mathbf{v}$ che lo genera. Nella prossima sezione si vedrà come questa infrastruttura permette di studiare le simmetrie dell'equazione parassiale 3.1.

3.2 Simmetrie dell'equazione parassiale

Tutto l'impianto teorico mostrato nella sezione precedente si applica ai sistemi di equazioni differenziali mediante la seguente definizione:

> **Definizione**: *Il gruppo di simmetria di un sistema di equazioni differenziali è il più grande gruppo di trasformazioni agenti sulle variabili indipendenti e dipendenti del sistema con la proprietà che esso trasforma soluzioni del sistema in altre soluzioni.*

[7] Si è volutamente utilizzato lo stesso simbolo usato per definire i gruppi di trasformazioni. Con $\mathbf{x}$ ora indichiamo, per brevità, tutte le componenti $(x^1, \ldots, x^n)$.

Nel caso specifico della 3.1, è possibile associare ad essa una varietà $M \subset X \times V$, dove $X = \Re^p$, con $p = 3$ indicante il numero di variabili indipendenti e $V = \Re^q$, con $q = 1$ indicante il numero di variabili dipendenti. Per quanto detto fin qui sappiamo che a tale varietà è possibile associare un campo vettoriale tangente di espressione

$$\mathbf{v} = \xi(x, y, z, u)\partial_x + \eta(x, y, z, u)\partial_y + \tau(x, y, z, u)\partial_z + \phi(x, y, z, u)\partial_u. \quad (3.21)$$

che genera il gruppo di trasformazioni

$$\Psi(\epsilon, \mathbf{v}) = e^{\epsilon \mathbf{v}}. \quad (3.22)$$

dove Ψ è la trasformazione indotta dal campo $\mathbf{v}$ e ϵ è un parametro reale caratterizzante il gruppo. Una trasformazione di simmetria è una mappa che ci permette di passare da un punto di partenza (x, y, z, u), sulla varietà M, ad un altro punto (x', y', z', u') della stessa varietà per mezzo della relazione

$$(x', y', z', u') = \Psi(\epsilon, \mathbf{v})(x, y, z, u) = e^{(\epsilon \mathbf{v})}(x, y, z, u). \quad (3.23)$$

Il problema è trovare l'espressione esplicita per il campo vettoriale che compare nella (3.23). A tal fine si può utilizzare la seguente procedura. E' necessario estendere lo spazio $X \times V$ di modo che esso contenga anche le derivate fino al secondo ordine (che è il massimo ordine dell'equazione 3.1) della variabile dipendente u, un'operazione detta *prolungamento*. Di conseguenza il campo vettoriale prolungato diviene

$$\begin{aligned} \mathbf{pr}^{(2)}(\mathbf{v}) &= \xi\partial_x + \eta\partial_y + \tau\partial_z + \phi\partial_u + \phi^x\partial_{u_x} + \phi^y\partial_{u_y} + \phi^z\partial_{u_z} + \phi^{xx}\partial_{u_{xx}} + \\ &+ \phi^{yy}\partial_{u_{yy}} + \phi^{zz}\partial_{u_{zz}} + \phi^{xy}\partial_{u_{xy}} + \phi^{xz}\partial_{u_{xz}} + \phi^{yz}\partial_{u_{yz}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

dove non si è esplicitata, per comodità, la dipendenza dalle variabili x, y, z, u. Possiamo riscriverlo come, nel caso più generale di p variabili indipendenti e una variabile dipendente,

$$\mathbf{pr}^{(n)}(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{p} \xi_i \partial_{x_i} + \phi\partial_u + \sum_J \phi^J \partial_{u_J}. \quad (3.25)$$

definendo $J = (j_1, j_2, ...j_l)$, $1 \leq j_l \leq p$, $1 \leq l \leq n$ in cui n è l'ordine dell'equazione. Tutti i coefficienti dei termini nelle derivate della u che compaiono nella (3.24) sono esprimibili, in termini di ξ, η, τ, ϕ e le loro relative derivate, mediante la formula (si veda in [36], pag. 108)

$$\phi^J = D_J(\phi - \sum_{i=1}^{p} \xi^i u_i) + \sum_{i=1}^{p} \xi^i u_{J,i}. \quad (3.26)$$

dove $u_i = \partial u/\partial x_i$ e $u_{J,i} = \partial u_J/\partial x_i$ con x_i variabile generica e D_J indicante l'operazione di derivazione totale. Come si giustificherà tra un attimo, tra tutti tali 13 coefficienti incogniti soltanto $\phi^{xx}, \phi^{yy}, \phi^z$ sono essenziali per le nostre finalità. Infatti a questo punto ci viene in ausilio un teorema che afferma

Teorema: *Supponiamo che* $\Delta_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u^{(n)}}) = 0$, $\nu = 1, \ldots, l$ *sia un sistema di equazioni differenziali di rango massimo definito su* $M \subset X \times V$. *Se* G *è un gruppo locale di trasformazioni agenti su* M *e accade*
$\mathbf{pr}^{(n)}(\mathbf{v}) \left[\Delta_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u^{(n)}})\right] = 0, \quad \nu = 1, \ldots, l$
ogni volta che
$\Delta_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u^{(n)}}) = 0$
per ogni generatore infinitesimo $\mathbf{v}$ *di* G, *allora* G *è un gruppo di simmetria del sistema.*

Il teorema fa uso del concetto di sistema di equazioni differenziali di rango massimo che si può definire come segue:

Definizione: *Se* $\Delta_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u^{(n)}}) = 0$, $\nu = 1, \ldots, l$ *è un sistema di equazioni differenziali, esso è detto di rango massimo se la matrice Jacobiana del sistema, di dimensioni* $l \times (p + qp^{(n)})$, $J_\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) = \left(\frac{\partial \Delta_\nu}{\partial x^i}, \frac{\partial \Delta_\nu}{\partial u^\alpha_J}\right)$, *di tutte le variabili* $(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})$, *è di rango* l *ogni volta che* $\Delta_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) = 0$.[8]

Se calcoliamo la matrice Jacobiana dell'equazione 3.1 otteniamo

$$\begin{aligned} J_\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) &= J_\Delta(x, y, z, u, u_x, u_y, u_z, u_{xx}, u_{yy}, u_{zz}, u_{xy}, u_{xz}, u_{yz}) \\ &= \left(\frac{\partial \Delta}{\partial x^i}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_J}\right) \\ &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 2ik, 1, 1, 0, 0, 0, 0) \end{aligned} \tag{3.28}$$

che ha rango pari ad 1. Poichè questo valore coincide con il numero l delle equazioni costituenti il sistema, possiamo dire che l'equazione parassiale è un'equazione di rango massimo.[9] Allora, per il teorema sopra enunciato, si possono ottenere i gruppi di simmetria dell'equazione mediante la seguente condizione:

$$\mathbf{pr}^{(2)}(\mathbf{v})[u_{xx} + u_{yy} + 2iku_z] = 0. \tag{3.29}$$

che, tenendo conto della relazione (3.24), implica

$$\phi^{xx} + \phi^{yy} + 2ik\phi^z = 0. \tag{3.30}$$

[8] Si ricordi che p è il numero di variabili indipendenti, q quello delle variabili dipendenti, n è l'ordine del sistema e $\alpha = 1, \ldots, q$. Con $\mathbf{x}$ si è indicato il vettore delle variabili indipendenti, di dimensione p, mentre con $\mathbf{u^{(n)}}$ quello delle variabili dipendenti e relative derivate fino all'ordine n di dimensione pari a $qp^{(n)}$, dove

$$qp^{(n)} = q \begin{pmatrix} p+n \\ n \end{pmatrix}. \tag{3.27}$$

.

[9] Un'equazione di rango non massimo è la seguente: $(u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y))^2 = 0$. Infatti ora la matrice Jacobiana vale: $J_\Delta(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{yy}, u_{xy}) = (0, 0, 0, 0, 0, 2(u_{xx} + u_{yy}), 2(u_{xx} + u_{yy}), 0)$ che, per tutte le soluzioni dell'equazione $(u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y))^2 = 0$, ha rango pari a 0 che è diverso da $l = 1$.

Effettuando esplicitamente i calcoli, applicando le definizioni (3.26), troviamo

$$\begin{aligned}
\phi^{xx} &= \phi_{xx} + u_x(2\phi_{xu} - \xi_{xx}) + u_y(-\eta_{xx}) + u_z(-\tau_{xx}) + u_x^2(\phi_{uu} - 2\xi_{xu}) + \\
&+ u_x u_y(-2\eta_{xu}) + u_x u_z(-2\tau_{xu}) + u_{xx}u_x(-3\xi_u) + u_{xx}u_y(-\eta_u) + \\
&+ u_{xx}u_z(-\tau_u) + u_{xy}u_x(-2\eta_u) + u_{xx}(\phi_u - 2\xi_x) + u_x^3(-\xi_{uu}) + \\
&+ u_{yx}(-2\eta_x) + u_{zx}(-2\tau_x) + u_x u_{zx}(-2\tau_u) + u_x^2 u_y(-\eta_{uu}) + \\
&+ u_x^2 u_z(-\tau_{uu}). \qquad (3.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi^{yy} &= \phi_{yy} + u_y(2\phi_{yu} - \eta_{yy}) + u_x(-\xi_{yy}) + u_z(-\tau_{yy}) + u_y^2(\phi_{uu} - 2\eta_{yu}) + \\
&+ u_x u_y(-2\xi_{yu}) + u_y u_z(-2\tau_{yu}) + u_{yy}u_y(-3\eta_u) + u_{yy}u_x(-\xi_u) + \\
&+ u_{yy}u_z(-\tau_u) + u_{xy}u_y(-2\xi_u) + u_{yy}(\phi_u - 2\eta_y) + u_y^3(-\eta_{uu}) + \\
&+ u_{yx}(-2\xi_y) + u_{zy}(-2\tau_u) + u_y u_{zy}(-2\tau_u) + u_y^2 u_x(-\xi_{uu}) + \\
&+ u_y^2 u_z(-\tau_{uu}). \qquad (3.32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi^{z} &= \phi_z + u_z(2\phi_u - \tau_z) + u_x(-\xi_z) + u_z u_x(-\xi_u) + u_y(-\eta_z) + \\
&+ u_z u_y(-\eta_u) + u_z^2(-\tau_u). \qquad (3.33)
\end{aligned}$$

Inserendo la forma esplicita di coefficienti 3.31, 3.32 e 3.33 nella (3.30), e eguagliando i termini omologhi che compaiono a destra e sinistra dell'equazione, si ottiene

$$\phi_{xx} + \phi_{yy} = \phi_t. \qquad (3.34)$$

$$(2\phi_{xu} - \xi_{xx}) - \xi_{yy} = -\xi_t. \qquad (3.35)$$

$$(2\phi_{yu} - \eta_{yy}) - \eta_{xx} = -\eta_t. \qquad (3.36)$$

$$2\xi_x = \tau_t. \qquad (3.37)$$

$$2\eta_y = \tau_t. \qquad (3.38)$$

$$\tau_x = \tau_y = \tau_u = 0. \qquad (3.39)$$

$$\eta_u = \xi_u = 0. \qquad (3.40)$$

$$\phi_{uu} = 0. \qquad (3.41)$$

dove si è definita la variabile ausiliaria $t = -z/(2ik)$. La risoluzione di questo sistema di equazioni non è difficile, anche se un po' lunga. Riportiamo qui solo la soluzione che può essere verificata per sostituzione,

$$\tau = c_1 + 2c_2 t + 4c_3 t^2. \qquad (3.42)$$

$$\xi = c_2 x + 4c_3 tx - 2c_4 t + c_5. \qquad (3.43)$$

$$\eta = c_2 y + 4c_3 ty - 2c_4 t + c_6. \qquad (3.44)$$

$$\phi = [-c_3(x^2+y^2) + c_4(x+y) - 4c_3 t + c_7]u + \alpha(x,y,t). \tag{3.45}$$

dove α è una generica funzione soluzione della 3.1 ed i $c_i (i = 1, 2, ...7)$ sono delle costanti di integrazione. Ciascuna di tali costanti è collegata ad un particolare generatore di simmetria $\mathbf{v}_i$ che può essere ottenuto ponendo ordinatamente a zero tutte le costanti eccetto la i-ma. Di seguito si riporta l'insieme completo di generatori ottenuti in tal modo:[10]

$$\mathbf{v}_1 = \partial_t, \ (c_1). \tag{3.46}$$

$$\mathbf{v}_2 = x\partial_x + y\partial_y + 2t\partial_t, \ (c_2). \tag{3.47}$$

$$\mathbf{v}_3 = 4tx\partial_x + 4ty\partial_y + 4t^2\partial_t + (-x^2 - y^2 - 4t)u\partial_u, \ (c_3). \tag{3.48}$$

$$\mathbf{v}_4 = -2t\partial_x - 2t\partial_y + (x+y)u\partial_u, \ (c_4). \tag{3.49}$$

$$\mathbf{v}_5 = \partial_x, \ (c_5). \tag{3.50}$$

$$\mathbf{v}_6 = \partial_y, \ (c_6). \tag{3.51}$$

$$\mathbf{v}_7 = u\partial_u, \ (c_7). \tag{3.52}$$

dove tra parentesi si è indicato di volta in volta l'unico coefficiente dei c_i differente da zero (e posto pari ad uno). Sappiamo, da tutta la teoria riportata precedentemente, che ognuno di questi campi vettoriali genera una trasformazione infinitesima su M che è una trasformazione di simmetria. Per esempio il vettore $\mathbf{v}_5$ opera come segue:

$$e^{\epsilon\partial_x}(x,y,z,u) = \left[(1 + \epsilon\partial_x + \frac{(\epsilon\partial_x)^2}{2!} + \ldots)x, y, z, u\right] = (x+\epsilon, y, z, u). \tag{3.53}$$

e corrisponde cioè ad una traslazione in x. Quindi se $u(x,y,z)$ è una soluzione dell'equazione parassiale allora lo sarà anche $u(x+\epsilon, y, z)$, un risultato questo ben noto, che esprime invarianza per traslazioni della 3.1. Un analogo discorso vale per i vettori $\mathbf{v}_6$ e $\mathbf{v}_1$, che rappresentano rispettivamente l'invarianza in traslazione lungo y e z. Un altro generatore importante è il $\mathbf{v}_2$ che assieme al $\mathbf{v}_7$ rappresenta la simmetria per cambi di scala (*scaling* in inglese) che ha un ruolo importante, per esempio, nella ricerca dei cosiddetti campi *shape invariant* [36]-[37]. Tornando all'obiettivo di questo capitolo, ovvero ricercare una giustificazione teorica all'esistenza di soluzioni di campo a modulazione Gaussiana, analizziamo il vettore $\mathbf{v}_3$, relazione 3.48 . Data la solita soluzione di partenza $u(x,y,t)$, esso porta alla nuova soluzione

$$\tilde{u}(x,y,z) = \frac{1}{1+4\epsilon t} e^{\left[-\epsilon\frac{x^2+y^2}{(1+4\epsilon t)}\right]} u\left(\frac{x}{1+4\epsilon t}, \frac{y}{1+4\epsilon t}, \frac{z}{1+4\epsilon t}\right). \tag{3.54}$$

[10] La funzione $\alpha(x,y,t)$ che compare nella 3.45, tiene conto della ben nota proprietà di sovrapposizione delle soluzioni per l'equazione parassiale. Da qui in avanti verrà posta pari a zero.

Tornando ora alla vecchia coordinata z e ponendo $2\epsilon/k = 1/L$ and $w_0^2 = 1/\epsilon$,[11] risulta

$$\tilde{u}(x,y,z) = \frac{1}{1+iz/L} e^{\left[-\frac{x^2+y^2}{w_0^2(1+iz/L)}\right]} u\left(\frac{x}{1+iz/L}, \frac{y}{1+iz/L}, \frac{z}{1+iz/L}\right). \tag{3.55}$$

che rappresenta proprio ciò che stavamo cercando. In effetti la 3.55 ci dice che ogni qual volta conosciamo una soluzione dell'equazione parassiale, ne abbiamo immediatamente un'altra ottenuta riscalando opportunamente le variabili (x, y, z) e moltiplicando il campo per una Gaussiana bidimensionale. Supponiamo, per esempio, di avere la soluzione

$$u(x,y,z) = C. \tag{3.56}$$

con C costante. Essa è ovviamente soluzione della 3.1 e, mediante la 3.55, fornisce anche la soluzione

$$\tilde{u}(x,y,z) = \frac{C}{1+iz/L} e^{-\frac{x^2+y^2}{w_0^2(1+iz/L)}}. \tag{3.57}$$

che è il fascio Gaussiano fondamentale, in cui w_0 rappresenta la cintola del fascio e $L = \pi w_0^2/\lambda$ è la lunghezza di Rayleigh [5]-[17]-[41]. E' curioso osservare come la derivazione del fascio Gaussiano mediante la teoria dei gruppi sia molto semplice in contrasto con la procedura *tradizionale*, che lo deriva mediante strumenti di calcolo algebrico/differenziali assai più comuni ma con un procedimento notevolmente più laborioso.
Arrivati a questo punto possiamo finalmente tornare alla questione che ha motivato tutta questa analisi sulle simmetrie dell'equazione 3.1, ovvero provare l'esistenza di soluzioni parassiali aperturate con una finestra Gaussiana, ottenute a partire dalle classi di campi non-diffrangenti, soluzioni dell'equazione di Helmholtz scalare, descritte nel capitolo precedente. Abbiamo visto, infatti, che un fascio a sezione invariante può scriversi come

$$U(q_1, q_2, z) = V\left[q_1(x,y), q_2(x,y)\right] e^{ik_z z} = f(x,y) e^{ik_z z}. \tag{3.58}$$

con $(q_1(x,y), q_2(x,y))$ coppia generica di coordinate trasverse in uno dei sistemi di coordinate curvilinee ortogonali a simmetria cilindrica. Dalla relazione di separabilità 2.3 segue

$$k_z = \sqrt{k^2 - k_t^2} = k\sqrt{1 - \frac{k_t^2}{k^2}} \cong k(1 - \frac{k_t^2}{2k^2}). \tag{3.59}$$

condizione soddisfatta se

$$k_t << k. \tag{3.60}$$

[11] La scelta di tali valori sarà più evidente tra poco

Se si guarda la condizione 3.60 in termini di sviluppo in onde piane, formula 1.17, si vede che essa equivale a richiedere uno spettro angolare $A_0(p,q)$ che sia trascurabile per valori di (p,q) tali che $\sqrt{p^2+q^2} >> \frac{1}{\lambda}$, il che ci pone proprio nel limite parassiale. Ne segue che il campo

$$U_{parax}(q_1,q_2,z) = V\left[q_1(x,y),q_2(x,y)\right]e^{-i\frac{k_t^2}{2k}z} = f(x,y)e^{-i\frac{k_t^2}{2k}z}. \qquad (3.61)$$

è soluzione dell'equazione parassiale 3D. Questo rappresenta un utile legame con le soluzioni dell'equazione di Helmholtz 1.13. Visto che la 3.61 è una soluzione della 3.1, applicando la proprietà 3.55 otteniamo anche l'esistenza del seguente campo parassiale

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{parax}(q_1,q_2,z) &= \frac{1}{1+iz/L}f(\frac{x}{1+iz/L},\frac{y}{1+iz/L})e^{\left[-\frac{x^2+y^2}{w_0^2(1+iz/L)}\right]} \\ &\times\ e^{\left[-\frac{izk_t^2}{2k(1+iz/L)}\right]}e^{ikz}. \qquad (3.62)\end{aligned}$$

che era l'obiettivo che ci eravamo prefissati all'inizio di questa analisi. Infatti, se la 3.58 è un fascio di Bessel, la 3.62 fornisce i fasci di Bessel-Gauss nell'espressione già riportata nella 2.15. Se invece la 3.58 rappresenta rispettivamente i fasci di Mathieu o quelli parabolico-cilindrici, la 3.62 fornirà i fasci di Mathieu-Gauss e parabolico-cilindrici di Gauss.
Prima di chiudere la presente sezione, si vuole mettere in evidenza che recentemente su questo argomento si è concentrata la ricerca da parte di diversi autori, ricerca che ha portato in ogni caso a derivare la 3.62, seguendo però dei percorsi differenti. In particolare, nel suo lavoro del 2004, Kiselev lo ha ottenuto applicando il metodo di ricerca delle soluzioni per separazione delle variabili all'equazione 3.1 [43], mentre Gutierrez-Vega e Bandres, nel 2005, sono pervenuti al medesimo risultato inserendo un'opportuna, ben pensata, soluzione di prova dentro l'equazione parassiale [44]. A parere di chi scrive, il metodo indicato qui, cioè quello che sfrutta la teoria dei gruppi [42], ha il vantaggio di mettere in evidenza quale sia il fondamento di tale risultato, ovvero una simmetria nascosta dell' equazione 3.1, e perchè l'inviluppo Gaussiano è ad essa così intimamente connesso. Nei prossimi capitoli si vedrà che campi del tipo 3.62 non esauriscono certamente l'interesse verso il problema parassiale, anzi semmai lo accrescono. In effetti si mostrerà che si possono trovare delle altre soluzioni parassiali, con proprietà differenti, di cui si parlerà ampiamente in seguito, che vanno incontro a esigenze di natura diversa. Tuttavia, nella prossima sezione del presente capitolo si desidera ancora approfondire le simmetrie in ottica parassiale, cercando di inquadrare il problema nell'ambito delle teorie di campo moderne.

3.3 Formalismo Lagrangiano per campi parassiali

La maggior parte delle teorie di campo moderne fa un grande uso della descrizione Lagrangiana per il campo, ricavando le equazioni del moto per esso mediante metodi variazionali. Ciò viene effettuato poichè, grazie ad una Lagrangiana ben costruita, si realizza la quantizzazione del campo in modo piuttosto diretto (per mezzo del formalismo degli integrali di cammino oppure mediante quantizzazione canonica) e contemporaneamente si possono rispettare altre condizioni, come per esempio l'invarianza per trasformazioni di Lorentz (in modo da avere una teoria relativistica) e così via. Ciò che si vuole mostrare è che anche per l'ottica parassiale si può avviare un procedimento di questo tipo ed in particolare si vuole mettere in evidenza a quali risultati si possa pervenire in questo modo. L'utilizzo del formalismo Lagrangiano non è affatto nuovo per l'ottica; infatti, proprio sulla analogia tra meccanica di particella libera e comportamento di un raggio luminoso si è poggiata la costruzione della base teorica della meccanica ondulatoria [16], [45], [46], [47], [75]. In particolare la descrizione Lagrangiana per l'ottica geometrica nasce dal principio di Fermat, che afferma che è nulla la variazione prima dell'integrale

$$\int n(\omega) ds. \tag{3.63}$$

con $n(\omega)$ indice di rifrazione (in genere funzione della pulsazione ω del campo) e $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$, ed è totalmente equivalente al principio di Maupertuis[12], valido per una particella materiale,

$$\delta \int \sqrt{E - V(x, y, z)} ds = 0. \tag{3.64}$$

dove il ruolo dell'indice di rifrazione $n(\omega)$ viene ora ricoperto dal termine cinetico $\sqrt{E - V(x, y, z)}$. Nella 3.64 E è l'energia fissata della particella, $V(x, y, z)$ il potenziale e δ l'operazione di variazione prima. Detto ciò si vuole però anticipare che la descrizione Lagrangiana che invece si vuole introdurre qui non è quella costruita su di uno spazio delle fasi in cui le variabili siano le coordinate spaziali x, y, z e le loro derivate, grazie alla quale si riesce ad ottenere, minimizzando l'azione associata, le traiettorie dei raggi luminosi, ma una Lagrangiana che sia funzione del campo stesso.

3.3.1 Lagrangiana ed equazioni del moto

Trattando esclusivamente di ottica parassiale per campi monocromatici (e quindi stazionari), decidiamo che z sia la direzione media di propagazione

[12] Il principio di Maupertuis è una variante del principio di Lagrange in cui si impone che il sistema meccanico sia vincolato a conservare l'energia durante il moto.

dei campi e ad essa ci riferiremo come alla variabile di *evoluzione*, riservandole dunque un ruolo distinto rispetto alle altre due variabili spaziali x, y. Definiamo poi gli operatori differenziali $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x^\alpha} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ e $\partial^\alpha = (\partial^x, \partial^y, \partial^z)$ dove si è indicato, per semplicità, con x^α la variabile generica[13].
Partiamo dall'equazione parassiale 1.43 per un campo Φ

$$\nabla_\perp^2 \Phi(x, y, z) + 2ik\partial_z \Phi(x, y, z) = 0. \tag{3.65}$$

e per il campo complesso coniugato $\Phi^\star$

$$\nabla_\perp^2 \Phi^\star(x, y, z) - 2ik\partial_z \Phi^\star(x, y, z) = 0. \tag{3.66}$$

definiti su tutto lo spazio (x, y, z). La dinamica di questi campi è governata da una Lagrangiana L che si scrive come

$$\mathrm{L} = \int_S L_D dxdy. \tag{3.67}$$

dove

$$L_D = L_D(\Phi, \Phi^\star, \partial_\mu \Phi, \partial_\mu \Phi^\star). \tag{3.68}$$

è detta *densità di Lagrangiana.* In questa sezione, per comodità di scrittura, si useranno le lettere greche per indicare tutte e tre le variabili coinvolte, ovvero $\alpha, \beta, \gamma, \ldots = x, y, z$ mentre le lettere minuscole a, b, c indicheranno solo le variabili trasverse x, y. Se ora consideriamo due piani differenti z_1 e z_2 e supponiamo di aver fissato i campi su questi due piani

$$\begin{aligned} &\Phi(x, y, z_1),\ \Phi^\star(x, y, z_1) \quad z = z_1 \\ &\Phi(x, y, z_2),\ \Phi^\star(x, y, z_2) \quad z = z_2. \end{aligned} \tag{3.69}$$

possiamo introdurre l'azione S

$$S = \int_{z_1}^{z_2} \int_S L_D dxdydz. \tag{3.70}$$

e ricercare i campi che la estremizzino.[14] In questo modo si deve essere capaci di pervenire alle equazioni del moto, anche note come equazioni di Eulero-Lagrange. Supponiamo di conoscere già le due soluzioni, $\Phi_0(x, y, z)$

[13] Lavorando in uno spazio euclideo tridimensionale, ne risulta la formale identificazione tra vettori e covettori (in realtà oggetti ben distinti, appartenenti a due spazi vettoriali differenti) mediante la metrica $\eta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$, con δ simbolo di Kronecker.

[14] Il fondamento di tutti i principi variazionali presenti in fisica classica può trovare una suggestiva spiegazione nell'ambito della Meccanica Quantistica. Essi sono infatti manifestazione del *principio della fase stazionaria* applicato alla teoria quantistica così come pensata da Richard P. Feynman, ovvero formulata mediante gli integrali sui cammini [75], [35].

e $\Phi_0^\star(x,y,z)$ che estremizzano la 3.70, e consideriamone un'altra coppia, definita come

$$\begin{aligned}\Phi(x,y,z) &= \Phi_0(x,y,z) + \epsilon\eta(x,y,z)\\ \Phi^\star(x,y,z) &= \Phi_0^\star(x,y,z) + \epsilon\eta^\star(x,y,z).\end{aligned} \tag{3.71}$$

dove le funzioni η e $\eta^\star$ soddisfano le condizioni al contorno

$$\begin{aligned}\eta(x,y,z_1) &= \eta^\star(x,y,z_1) = 0\\ \eta(x,y,z_2) &= \eta^\star(x,y,z_2) = 0.\end{aligned} \tag{3.72}$$

ed ϵ è un parametro variabile. Se inseriamo la coppia di funzioni della 3.71 dentro l'azione 3.70 si ottiene

$$S(\epsilon) = \int_{z_1}^{z_2}\int_S L_D(\Phi_0+\epsilon\eta, \Phi^\star+\epsilon\eta^\star, \partial_\mu\Phi+\epsilon\partial_\mu\eta, \partial_\mu\Phi^\star+\epsilon\partial_\mu\eta^\star)dxdydz. \tag{3.73}$$

Per quanto detto prima, la derivata della $S(\epsilon)$ rispetto al parametro ϵ deve essere nulla, per cui si ottiene

$$\begin{aligned}\frac{dS(\epsilon)}{d\epsilon}_{|\epsilon=0} &= \int\int_S \left[\frac{\partial L_D}{\partial\Phi}_{|\epsilon=0}\eta + \frac{\partial L_D}{\partial\Phi^\star}_{|\epsilon=0}\eta^\star\right] dxdydz\\ &+ \int\int_S \left[\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi)}_{|\epsilon=0}\partial_\mu\eta + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi^\star)}_{|\epsilon=0}\partial_\mu\eta^\star\right] dxdydz\\ &= \int\int_S \left[\frac{\partial L_D}{\partial\Phi}_{|\epsilon=0} - \partial_\mu\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi)}_{|\epsilon=0}\right]\eta\, dxdydz\\ &+ \int\int_S \left[\frac{\partial L_D}{\partial\Phi^\star}_{|\epsilon=0} - \partial_\mu\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi^\star)}_{|\epsilon=0}\right]\eta^\star\, dxdydz.\end{aligned} \tag{3.74}$$

Poichè η e $\eta^\star$ possono essere arbitrarie[15] si ottengono le equazioni di Eulero-Lagrange cercate

$$\begin{aligned}\frac{\partial L_D}{\partial\Phi} - \partial_\mu\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi)} &= 0\\ \frac{\partial L_D}{\partial\Phi^\star} - \partial_\mu\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu\Phi^\star)} &= 0.\end{aligned} \tag{3.75}$$

[15] I campi η e $\eta^\star$ vengono considerati come due variabili indipendenti, le cui variazioni possano essere realizzate indipendentemente, cosa che è evidentemente non vera. Ma si può dimostrare che esse possono essere considerate come *formalmente* indipendenti, per cui tutta l'analisi che ne segue ha validità, pensandole costituite da due campi indipendenti η_R e η_I, tali che $\eta = \eta_R + i\eta_I$ e ricavando le equazioni di Eulero Lagrange con essi. Combinando le equazioni ottenute da η_R e da η_I si riottengono le stesse equazioni di Eulero-Lagrange che si sarebbero ottenute si si fosse operato direttamente con η e $\eta^\star$.

Tenuto conto che noi già conosciamo le equazioni di moto per i campi, che altro non sono che le equazioni parassiali 3.65 e 3.66, dobbiamo in realtà risolvere il problema inverso, ovvero risalire dalle equazioni del moto ad una forma per la densità di Lagrangiana L_D. In particolare per L_D si ottiene la seguente espressione

$$\begin{aligned} L_D(\Phi, \Phi^\star, \partial_\mu\Phi, \partial_\mu\Phi^\star) &= \partial_a\Phi\partial^a\Phi^\star + ik\Phi\partial_z\Phi^\star - ik\Phi^\star\partial_z\Phi \\ &= \nabla_\perp\Phi\cdot\nabla_\perp\Phi^\star + ik\Phi\partial_z\Phi^\star - ik\Phi^\star\partial_z\Phi \\ &= |\nabla_\perp\Phi|^2 + ik\Phi\partial_z\Phi^\star - ik\Phi^\star\partial_z\Phi. \end{aligned} \tag{3.76}$$

Nello scrivere la 3.76, che gode della proprietà $L_D = L_D^\star$, si è fatto uso della notazione di Einstein sugli indici ripetuti. Che la densità di Lagrangiana 3.76 permetta di riottenere le equazioni parassiali, mediante le equazioni di Eulero-Lagrange, è facilmente verificabile; infatti valgono le seguenti relazioni

$$\frac{\partial L_D}{\partial\Phi} = ik\partial_z\Phi^\star. \tag{3.77}$$

$$\frac{\partial L_D}{\partial\Phi^\star} = -ik\partial_z\Phi. \tag{3.78}$$

$$-\partial_\alpha\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\alpha\Phi)} = -\partial_a\partial^a\Phi^\star + ik\partial_z\Phi^\star. \tag{3.79}$$

$$-\partial_\alpha\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\alpha\Phi^\star)} = -\partial_a\partial^a\Phi - ik\partial_z\Phi. \tag{3.80}$$

che inserite nelle 3.75 forniscono la coppia di equazioni parassiali 3.65 e 3.66. Trovare la forma della Lagrangiana è la parte essenziale per gli sviluppi che seguiranno. Infatti a partire da essa si può definire tutta una serie di quantità, cosa che si farà nella prossima sezione.

3.3.2 Hamiltoniana, corrente di energia e tensore energia-momento

Una volta introdotta la densità di Lagrangiana L_D si può introdurre la densità di Hamiltoniana definita come segue

$$\mathrm{H} = -\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z\Phi)}\partial_z\Phi - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z\Phi^\star)}\partial_z\Phi^\star + L_D. \tag{3.81}$$

ovvero risulta

$$\mathrm{H} = \partial_a\Phi\partial^a\Phi^\star = |\nabla_\perp\Phi|^2. \tag{3.82}$$

e l'energia totale sarà dunque pari a

$$\mathrm{E} = \int_S \mathrm{H}dxdy = \int_S |\nabla_\perp\Phi|^2 dxdy. \tag{3.83}$$

Come si vede la 3.82 è definita positiva, come deve essere. Osserviamo inoltre che può essere posta come

$$\mathrm{H} = \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi^\star - \partial_z \Phi \partial^z \Phi^\star = |\nabla \Phi|^2 - |\partial_z \Phi|^2. \tag{3.84}$$

Ci aspettiamo che il campo si propaghi nello spazio libero conservando l'energia totale e quindi dovrà esistere una corrente di energia, chiamiamola $\mathbf{s}$, che rispetti l'equazione di continuità

$$\partial_z \mathrm{H} + \nabla_\perp \cdot \mathbf{s} = 0. \tag{3.85}$$

In effetti se si pone

$$s^a = -\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_a \Phi)} \partial_z \Phi - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_a \Phi^\star)} \partial_z \Phi^\star. \tag{3.86}$$

ovvero, utilizzando la 3.76,

$$s^a = -\partial_a \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_a \Phi \partial_z \Phi^\star. \tag{3.87}$$

è facile verificare, facendo uso delle relazioni 3.65-3.66, che il vettore così introdotto soddisfa proprio l'equazione di continuità 3.85[16]. Notiamo che in notazione vettoriale la corrente di energia $\mathbf{s}$ si può anche scrivere come

$$\mathbf{s} = -\nabla_\perp \Phi^\star \partial_z \Phi - \nabla_\perp \Phi \, \partial_z \Phi^\star. \tag{3.88}$$

E' importante osservare che la 3.85 afferma che l'energia totale trasportata da un campo parassiale monocromatico si conserva su ogni piano (x, y). Ma se tra un piano ed il successivo non vi è un cambiamento di energia, significa che è nullo il flusso netto di energia lungo la direzione z, cosa che si riflette nella forma della corrente di energia $\mathbf{s}$, che è puramente trasversa. Quindi esistono flussi di energia solo sui singoli piani (x, y), il che comporta una ridistribuzione dell'energia su di essi e quindi un cambiamento di H, che è all'origine dell'esistenza del momento lineare $\mathbf{s}$. Ne segue, quindi, che l'ottica parassiale scalare non ammette momenti lineari (ovvero l'analogo del vettore di Poynting nel caso elettromagnetico generale) diretti lungo z. Questa osservazione sarà importante quando più avanti si parlerà di rotazioni per il campo.
Sapendo che in una teoria di campo la densità di energia corrisponde alla componente T^{zz} del tensore energia-momento mentre la corrente di energia s^a corrisponde alla componente T^{za}, si può provare a scrivere la forma per il tensore energia-momento come segue [34]-[35]

$$T^{\alpha\beta} = -\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\beta \Phi)} \partial^\alpha \Phi - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\beta \Phi^\star)} \partial^\alpha \Phi^\star + \eta^{\alpha\beta} L_D$$

[16] Se ne darà prova esplicita nella prossima sezione.

$$= \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} & T^{xz} \\ T^{yx} & T^{yy} & T^{yz} \\ T^{zx} & T^{zy} & T^{zz} \end{bmatrix} \tag{3.89}$$

$$= \begin{bmatrix} T^{ab} & T^{az} \\ T^{zb} & T^{zz} \end{bmatrix}. \tag{3.90}$$

dove

$$\eta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3.91}$$

e $T^{zz} = \mathrm{H}$ è la densità di energia, $T^{za} = s^a$ è la corrente di energia, $T^{az} = g^a$ è la densità di momento e T^{ab} è la corrente di (densità di) momento. Secondo questa definizione la grandezza g^a è pari a

$$\begin{aligned} g^a = T^{az} &= -\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z \Phi)}\partial^a \Phi - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z \Phi^\star)}\partial^a \Phi^\star \\ &= ik\Phi^\star \partial_a \Phi - ik\Phi\partial_a \Phi^\star. \end{aligned} \tag{3.92}$$

oppure in notazione vettoriale

$$\mathbf{g} = ik\Phi^\star \nabla_\perp \Phi - ik\Phi\nabla_\perp \Phi^\star. \tag{3.93}$$

mentre

$$T^{ab} = -\frac{\partial L}{\partial(\partial_b \Phi)}\partial^a \Phi - \frac{\partial L}{\partial(\partial_b \Phi^\star)}\partial^a \Phi^\star + \eta^{ab} L. \tag{3.94}$$

Osserviamo che risulta $T^{\alpha\beta} = (T^{\alpha\beta})^\star$, ma in genere $T^{\alpha\beta} \neq T^{\beta\alpha}$, il che ha delle conseguenze importanti sulle proprietà simmetria dell'ottica parassiale. L'equazione di continuità sopra scritta può essere vista come un caso particolare di una legge di conservazione più ampia cui soddisfano le componenti di $T^{\alpha\beta}$. Nella prossima sezione vengono solo descritte tali leggi, mentre nella sezione successiva si procederà a darne una derivazione inquadrandole nel contesto più ampio delle trasformazioni di simmetria.

3.3.3 Conservazione del tensore energia-momento

Usando le equazioni del moto 3.65-3.66 si può mostrare che il tensore energia-momento è conservato secondo la seguente relazione

$$\partial_\beta T^{\alpha\beta} = 0. \tag{3.95}$$

Dalla 3.95 segue, fissando l'indice α uguale a z:

$$\partial_z T^{zz} + \partial_a T^{za} = 0, \text{ (conservazione dell'energia)} \tag{3.96}$$

che coincide con la 3.85[17] ed inoltre (per $\alpha = a$)

$$\partial_z T^{az} + \partial_a T^{ab} = 0, \text{ (conservazione del momento)} \tag{3.97}$$

che rappresenta la conservazione del momento. Analogamente si può provare che la divergenza di $\mathbf{g}$ si può mettere in relazione con la variazione lungo z di $|\Phi|^2$. Infatti risulta

$$\partial_a T^{az} - 2k^2 \partial_z |\Phi|^2 = 0, \text{ (conservazione di } |\Phi|^2) \tag{3.98}$$

che non rappresenta altro che l'equazione del trasporto (ovvero l'equivalente, in ottica, della equazione di continuità della meccanica quantistica), equazione che possiamo anche riscrivere in notazione vettoriale

$$\nabla_\perp \cdot \mathbf{g} - 2k^2 \partial_z |\Phi|^2 = 0. \tag{3.99}$$

Come prova della correttezza di queste relazioni, verifichiamo esplicitamente la validità per una di esse, per esempio la 3.96. Cominciamo con il calcolare la $\partial_x T^{zx}$. Si ha

$$\partial_x T^{zx} = \partial_x s^x = -\partial_x^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_x \Phi^\star \partial_{xz}^2 \Phi - \partial_x^2 \Phi \partial_z \Phi^\star - \partial_x \Phi \partial_{zx}^2 \Phi^\star. \tag{3.100}$$

e analogamente per $\partial_y T^{zy}$

$$\partial_y T^{zy} = \partial_y s^y = -\partial_y^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_y \Phi^\star \partial_{yz}^2 \Phi - \partial_y^2 \Phi \partial_z \Phi^\star - \partial_y \Phi \partial_{zy}^2 \Phi^\star. \tag{3.101}$$

Passiamo invece a calcolare $\partial_z T^{zz}$. Otteniamo

$$\partial_z T^{zz} = \partial_z H = \partial_{zx}^2 \Phi^\star \partial_x \Phi + \partial_x \Phi^\star \partial_{zx}^2 \Phi + \partial_{zy}^2 \Phi^\star \partial_y \Phi + \partial_y \Phi^\star \partial_{zy}^2 \Phi. \tag{3.102}$$

sommando le 3.100-3.101-3.102 otteniamo

$$\begin{aligned}
\partial_z H + \partial_x s^x + \partial_y s^y &= \partial_{zx}^2 \Phi^\star \partial_x \Phi + \partial_x \Phi^\star \partial_{zx}^2 \Phi + \partial_{zy}^2 \Phi^\star \partial_y \Phi + \partial_y \Phi^\star \partial_{zy}^2 \Phi + \\
&- \partial_x^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_x \Phi^\star \partial_{xz}^2 \Phi - \partial_x^2 \Phi \partial_z \Phi^\star - \partial_x \Phi \partial_{zx}^2 \Phi^\star + \\
&- \partial_y^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_y \Phi^\star \partial_{yz}^2 \Phi - \partial_y^2 \Phi \partial_z \Phi^\star - \partial_y \Phi \partial_{zy}^2 \Phi^\star \\
&= \partial_x^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_x^2 \Phi \partial_z \Phi^\star + \partial_y^2 \Phi^\star \partial_z \Phi - \partial_y^2 \Phi \partial_z \Phi^\star \\
&= -\partial_z \Phi (\partial_x^2 \Phi^\star + \partial_y^2 \Phi^\star) - \partial_z \Phi^\star (\partial_x^2 \Phi + \partial_y^2 \Phi) \\
&= -2ik \partial_z \Phi \partial_z \Phi^\star + 2ik \partial_z \Phi^\star \partial_z \Phi \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{3.103}$$

dove nella 3.103 si è fatto uso del teorema di Schwarz sulle derivate miste e delle relazioni 3.65-3.66.
Un ultimo commento merita la definizione data per l'energia. Infatti è d'uso definirla come l'integrale su tutto il piano del modulo quadro del campo

[17] Si ricordi che $T^{zz} = \mathrm{H}$.

($|\Phi|^2$) e non mediante l'integrale del modulo quadro del gradiente ($|\nabla_\perp \Phi|^2$), come invece risulta da quanto qui esposto. In realtà le due quantità sono tra loro legate. Infatti, sommando la 3.96 con la 3.98 si ottiene

$$\nabla_\perp \cdot (\mathbf{g} + \mathbf{s}) + \partial_z \left(\mathrm{H} - 2k^2 |\Phi|^2 \right) = 0. \tag{3.104}$$

Se integriamo su tutto il piano, e richiediamo che sia $\mathbf{g}$ che $\mathbf{s}$ si annullino all'infinito, si ottiene per la 3.104

$$\partial_z \int_{S_\infty} \left(\mathrm{H} - 2k^2 |\Phi|^2 \right) dxdy = 0. \tag{3.105}$$

dove si è fatto uso del teorema della divergenza. La 3.105 implica che l'integrale

$$\int_{S_\infty} \left(\mathrm{H} - 2k^2 |\Phi|^2 \right) dxdy. \tag{3.106}$$

sia una costante, che chiamiamo C. Quindi risulta

$$\mathrm{E} = C + 2k^2 \int_{S_\infty} |\Phi|^2 dxdy. \tag{3.107}$$

che è proprio il legame che si voleva evidenziare.
Nella prossima sezione si mostrerà quale sia l'utilità di aver introdotto il tensore $T^{\alpha\beta}$ e la sua importanza nello studio delle simmetrie dell'ottica parassiale.

3.3.4 Simmetrie, correnti e cariche conservate

La struttura più generale possibile di una legge di conservazione in fisica ha la forma seguente [35]

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu (\sqrt{g} J^\mu) = 0. \tag{3.108}$$

dove il vettore $\mathbf{J}$ viene interpretato come una (densità di) corrente e g è il determinante della matrice metrica. Nel caso in cui g sia costante, la 3.108 assume la forma più semplice

$$\partial_\mu (J^\mu) = 0. \tag{3.109}$$

Tornando all'ottica parassiale, se supponiamo di essere nello spazio euclideo tridimensionale con z variabile di evoluzione, la 3.109, integrata su di un volume τ di bordo S, ci dice che (Teorema della divergenza)

$$\int_\tau \left[\partial_\mu (J^\mu) \right] d\tau = \oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = 0. \tag{3.110}$$

dove $\mathbf{n}$ è la normale uscente dalla superficie chiusa S. Se ora si prende come volume un cilindro di bordo S_c, con asse di simmetria coincidente con l'asse z, la 3.110 si scrive come

$$\oint_{S_c} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{S_m} \mathbf{J}_\perp \cdot dS - \int_{S_a} J^z dS + \int_{S_b} J^z dS = 0. \tag{3.111}$$

dove S_m è la superficie del mantello del cilindro, S_a e S_b le due superfici di base e $\mathbf{J}_\perp$ la componente trasversa della corrente $\mathbf{J}$. Se si manda il raggio di base del cilindro all'infinito, faremo sempre l'ipotesi che le correnti si annullino sul suo mantello ($\mathbf{J}_\perp = 0$ su S_∞), di modo che succeda

$$\oint_{S_\infty} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = -\int_{S_a} J^z dS + \int_{S_b} J^z dS = 0. \tag{3.112}$$

Ne segue che la grandezza

$$\int_\infty J^z dxdy. \tag{3.113}$$

è una quantità conservata su ogni piano (x, y). Tutto quindi si riduce a trovare la forma delle componenti lungo z delle correnti. E' appunto qui che entra in gioco il tensore energia-momento nella sua forma completa per campi ottici parassiali, poichè con esso si riesce a costruire le correnti cercate. Infatti il teorema di Noether[18], nelle sue varie e differenti forme, a seconda della natura scalare o vettoriale della teoria di campo in studio, afferma che ogni qual volta ci sia una simmetria per il campo (rappresentata da una particolare trasformazione di simmetria) si potrebbe avere la conservazione di una determinata quantità, alla quale, in analogia con quanto accade per la carica elettrica in elettromagnetismo, si dà il nome di *carica*. In particolare, il teorema per campi scalari e per trasformazioni di simmetria che agiscano solo sulle variabili indipendenti, si può enunciare come segue:

> **Teorema di Noether per campi scalari**: *Se una teoria di campo concernente solo campi scalari Φ ammette una famiglia di trasformazioni di simmetria ad un parametro $f(\epsilon)$ con $\epsilon \in \Re$, allora la seguente corrente è conservata*
>
> $$J^\alpha = v^\beta T^\alpha_\beta. \tag{3.114}$$
>
> *dove T^α_β è il tensore energia-momento e $\mathbf{v}$ è il campo vettore caratteristico associato alla trasformazione $f(\epsilon)$*

Nella parte dedicata alla teoria dei gruppi di Lie sono stati ricavati i vettori generatori di simmetrie per l'equazione parassiale, per cui ora non ci resta che applicare il teorema di Noether per alcuni casi importanti. Incominciamo a studiare la simmetria per traslazioni, che come già detto è legata ai vettori $\mathbf{v_1}$, $\mathbf{v_5}$ e $\mathbf{v_6}$ (equazioni 3.46-3.50-3.51) una combinazione dei quali fornisce il vettore caratteristico

Traslazioni

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} a^x \\ a^y \\ a^z \end{pmatrix}. \tag{3.115}$$

[18] Per una dimostrazione piuttosto generale del teorema di Noether, che comprenda anche le simmetrie interne, si veda in appendice B.

dove a^α sono le costanti che definiscono le traslazioni nelle tre direzioni. Applicando il su citato teorema di Noether si ha, per la corrente conservata

$$J^\alpha = a^\beta T^\alpha_\beta. \tag{3.116}$$

che soddisfa l'equazione di conservazione

$$\partial_\alpha J^\alpha = \partial_\alpha (a^\beta T^\alpha_\beta) = a^\beta \partial_\alpha T^{\beta\alpha} = 0. \tag{3.117}$$

che è proprio la 3.95 descritta nella precedente sezione. L'origine di tale relazione è ora giustificata, essendo legata alla invarianza traslazionale del sistema. La carica integrale conservata sarà data dalla relazione:

$$\int_\infty J^z dxdy = \int_\infty T^{zz} dxdy = \int_\infty \mathrm{H} dxdy = \mathrm{E}. \tag{3.118}$$

Rotazioni

e coincide con l'energia totale. Una simmetria che non esiste in ottica parassiale è quella legata alle rotazioni attorno ad un asse qualunque; infatti l'equazione 3.65 non è invariante rispetto alle rotazioni rigide, cosa che si può dimostrare essere legata alla mancanza di simmetria del tensore energia-momento $T^{\alpha\beta}$ che nel nostro caso possiede soltanto la sottoparte T^{ab} simmetrica. Ciò comporta l'esistenza solo della simmetria per rotazioni qualsiasi attorno all'asse z. Allora mettiamoci in queste ipotesi meno generali, ovvero analizziamo le rotazioni generiche nel piano (x, y), e vediamo cosa si riesce ad ottenere. Il gruppo delle rotazioni attorno all'asse z ad un parametro lavora come segue

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\epsilon & -\sin\epsilon & 0 \\ \sin\epsilon & \cos\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{3.119}$$

dove con x', y', z' si sono indicate le variabili ruotate. Le componenti del campo vettoriale caratteristico, associato alla suddetta trasformazione, sono pari a

$$\mathbf{v} = \frac{d}{d\epsilon} \begin{pmatrix} \cos\epsilon & -\sin\epsilon & 0 \\ \sin\epsilon & \cos\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{3.120}$$

dove la derivata deve essere valutata in $\epsilon = 0$. Si ottiene dunque

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.121}$$

Dal teorema di Noether abbiamo che $J^\alpha = v^\beta T^\alpha_\beta$ è una corrente conservata, ovvero deve valere

$$\partial_\alpha J^\alpha = 0. \tag{3.122}$$

Esplicitando le componenti si ottiene

$$\partial_z(xT^{yz} - yT^{xz}) + \partial_a J^a = 0. \tag{3.123}$$

Se introduciamo la matrice antisimmetrica ω^a_b tale che

$$w^a = \omega^a_b x^b. \tag{3.124}$$

dove si è introdotto il vettore $x^a = (x, y)$, possiamo scrivere $J^a = w^b T^a_b$, dove

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}. \tag{3.125}$$

Si ottiene

$$\begin{aligned} \partial_a J^a &= \partial_x(-yT^x_x + xT^x_y) + \partial_y(-yT^y_x + xT^y_y) \\ &= x(\partial_x T^{yx} + \partial_y T^{yy}) - y(\partial_x T^{xx} + \partial_y T^{xy}). \end{aligned} \tag{3.126}$$

Utilizzando la già introdotta proprietà $\partial_\alpha T^{\beta\alpha} = 0$ si ottiene

$$\begin{aligned} \partial_z J^z + \partial_a J^a &= \partial_z(-yT^{xz} + xT^{yz}) - x\partial_z T^{yz} + y\partial_z T^{xz} \\ &= 0. \end{aligned} \tag{3.127}$$

che rappresenta la conservazione della corrente. Per quanto visto possiamo concludere che un campo parassiale deve conservare la grandezza

$$\int_\infty J^z dxdy = \int_\infty [\mathbf{r}_\perp \times \mathbf{g}]_z dxdy. \tag{3.128}$$

dove $\mathbf{r}_\perp$ è il vettore del piano trasverso (x, y). Se il campo lo si pensa del tipo

$$\Phi(x, y, z) = f(r, z). \tag{3.129}$$

con $x = r\cos\varphi$ e $y = r\sin\varphi$, si può dimostrare che il prodotto

$$[\mathbf{r}_\perp \times \mathbf{g}]_z. \tag{3.130}$$

e quindi anche la 3.128, è pari a zero (in ogni punto del piano trasverso i vettori $\mathbf{r}_\perp$ e $\mathbf{g}$ sono paralleli) e dunque è anche nulla la carica associata. Se invece richiediamo che sia l'intensità del campo ad essere a simmetria rotazionale, e non il campo, questo ultimo avrà una forma del tipo

$$\Phi(x, y, z) = f(r, z)e^{im\varphi},\ m \in N \tag{3.131}$$

(che comprende, nel caso $m = 0$, l'esempio appena discusso) e ovviamente la 3.130 non sarà più una costante in z (del resto l'ipotesi di simmetria del

campo dalla quale era stata derivata non esiste più). Si può però dimostrare che il suo integrale 3.128 è una carica conservata. Infatti la 3.130 diventa

$$\begin{aligned}
[\mathbf{r}_\perp \times \mathbf{g}]_z &= r\partial_z\Phi^\star \cos\varphi \left(\partial_r f \sin\varphi\, e^{im\varphi} + im\frac{f}{r}\cos\varphi\, e^{im\varphi}\right) \\
&+ r\partial_z\Phi \cos\varphi \left(\partial_r f^\star \sin\varphi\, e^{-im\varphi} - im\frac{f^\star}{r}\cos\varphi\, e^{-im\varphi}\right) \\
&- r\partial_z\Phi^\star \sin\varphi \left(\partial_r f \cos\varphi\, e^{im\varphi} - im\frac{f}{r}\sin\varphi\, e^{im\varphi}\right) \\
&- r\partial_z\Phi \sin\varphi \left(\partial_r f^\star \cos\varphi\, e^{-im\varphi} + im\frac{f^\star}{r}\sin\varphi\, e^{-im\varphi}\right) \\
&= -imf^\star\partial_z\Phi\, e^{-im\varphi} + imf\partial_z\Phi^\star\, e^{im\varphi} \\
&= -im\Phi^\star\partial_z\Phi + im\Phi\partial_z\Phi^\star \\
&= im\left(\Phi\partial_z\Phi^\star - \Phi^\star\partial_z\Phi\right). \qquad (3.132)
\end{aligned}$$

e per la carica associata si ha

$$\begin{aligned}
Q^z &= \int_{S_\infty} \left[im\left(\Phi\partial_z\Phi^\star - \Phi^\star\partial_z\Phi\right)\right] dxdy \\
&= \int_{S_\infty} \left[\frac{m}{2k}\left(\Phi\nabla_\perp^2\Phi^\star + \Phi^\star\nabla_\perp\Phi\right)\right] dxdy \\
&= \int_{S_\infty} \left[\frac{m}{2k}\nabla_\perp\cdot\left(\Phi^\star\nabla_\perp\Phi + \Phi\nabla_\perp\Phi^\star\right) - 2\mathrm{H}\right] dxdy \\
&= -\frac{m}{k}\int_{S_\infty} \mathrm{H}dxdy + \oint_{\partial S_\infty} \left(\Phi^\star\nabla_\perp\Phi + \Phi\nabla_\perp\Phi^\star\right)\cdot d\mathbf{l} \\
&= -\frac{m}{k}\int_{S_\infty} \mathrm{H}dxdy \\
&= -\frac{m}{k}\mathrm{E}. \qquad (3.133)
\end{aligned}$$

dove $d\mathbf{l}$ è l'elemento di linea orientato sul bordo della superficie S_∞, e E è l'energia, come definita nella 3.83[19]. Nella 3.133 si è fatto uso del teorema della divergenza e del lemma di Green[20]. Si è anche ipotizzato che i campi vadano a zero sui bordi della superficie S_∞. La relazione 3.133 può essere vista come la usuale regola che permette di ottenere il momento angolare orbitale a partire dal momento lineare. In questo caso però il ruolo di momento lineare è svolto dalla corrente di campo $\mathbf{g}$ (e non da quella di energia $\mathbf{s}$). In effetti la corrente $\mathbf{s}$ può essere vista come il momento lineare associato alla densità di energia H, mentre $\mathbf{g}$ può essere visto come il momento lineare associato alla densità di campo $|\Phi|^2$. La cosa importante è che da

[19] L'energia totale è indipendente da z, a patto che la corrente di energia si annulli sulla superficie all'infinito. Ciò deriva direttamente dall'equazione di conservazione dell'energia $\partial_z\mathrm{H} + \nabla_\perp\cdot\mathbf{s} = 0$, una volta che la si integri su tutto il piano (x, y).

[20] Il lemma di Green stabilisce la seguente relazione tra due campi scalari Φ e Ψ: $\nabla\cdot(\nabla\Phi\Psi) = \nabla\Phi\cdot\nabla\Psi + \Psi\nabla^2\Phi)$. Esso vale anche se all'operatore ∇ si sostituisce il $\nabla_\perp$.

queste relazioni si evince che l'ottica parassiale già contiene al suo interno la condizione di trasversalità dei momenti lineari, condizione necessaria per avere un momento angolare diretto lungo l'asse z. Dunque un campo come quello ipotizzato, ovvero del tipo $f(r,z)e^{im\varphi}$, tra cui si possono annoverare i fasci di Laguerre-Gauss oppure i fasci di Bessel-Gauss, possiede un momento angolare orbitale, che si conserva in propagazione, proporzionale ad m [48]-[49]-[50]-[51]-[52]-[53]-[54]. E' importante sottolineare che a questo risultato si è arrivati senza fare alcuna ipotesi aggiuntiva circa lo stato di polarizzazione del campo elettromagnetico di cui il campo scalare Φ sarebbe parte (come, al contrario, viene fatto da Allen *et al.* in [48]), poichè l'approssimazione parassiale predeve già automaticamente che i momenti lineari siano trasversi alla direzione di propagazione, potendo l'energia fluire solo sui piani ortogonali all'asse z.
La successiva, e ultima, proprietà di simmetria che si vuole analizzare è la cosiddetta invarianza in scala. In virtù degli aspetti peculiari dell'argomento si dedicherà ad esso una sezione specifica a parte, la prossima.

3.3.5 Invarianza in scala

Ora discutiamo un'altra trasformazione di simmetria per l'equazione parassiale, la cosiddetta invarianza in scala, e cerchiamo di ricavare la carica conservata associata. Il cosiddetto *scaling* è una trasformazione di simmetria leggermente differente rispetto a quelle viste fino ad adesso. Essa infatti non viene descritta mediante una isometria (come accade per le traslazioni e le rotazioni), ma mediante una trasformazione conforme. In ogni caso è l'esempio più semplice di trasformazione conforme[21], poichè i prodotti scalari sono non conservati soltanto per un termine costante positivo. Ripartiamo allora dall'equazione parassiale 3.65 ed effettuiamo la seguente trasformazione $x' = \frac{x}{\sigma}$, $y' = \frac{y}{\sigma}$ e $z' = \frac{z}{\sigma^2}$, dove σ è il parametro di scala; si ottiene, per la 3.65

$$\frac{1}{\sigma^2}(\nabla_\perp^2 \Phi(x,y,z) + 2ik\partial_z \Phi(x,y,z)) = 0. \tag{3.134}$$

che ovviamente ammette lo stesso insieme di soluzioni della 3.65 stessa. Inoltre sappiamo che anche il campo può essere riscalato, ovvero se si pone $\Phi' = \sigma^p \Phi$, l'equazione diviene

$$\sigma^p(\nabla_\perp^2 \Phi(x,y,z) + 2ik\partial_z \Phi(x,y,z)) = 0. \tag{3.135}$$

con $p \in \Re$, per la quale valgono le stesse considerazioni fatte per la 3.134. I due tipi di trasformazione di scala visti sono differenti poichè la prima interessa solo le coordinate x, y, z mentre la seconda agisce solo sul campo e ad essa ci si riferisce in genere come trasformazione di simmetria interna (un

[21] Una trasformazione conforme ha la caratteristica di non conservare i prodotti scalari, ma li altera per un termine positivo, eventualmente funzione di punto.

tipo di trasformazione interna è per esempio l'invarianza di gauge per la funzione d'onda in meccanica quantistica). Dal punto di vista del formalismo fin qui introdotto possiamo dire che una trasformazione è di simmetria se lascia l'azione 3.70 invariata.[22] Per la prima delle due trasformazioni introdotte l'azione trasformata S' diviene

$$S' = \int L[\Phi(\frac{y^a}{\sigma}, \frac{z'}{\sigma^2}), \Phi^\star(\frac{y^a}{\sigma}, \frac{z'}{\sigma^2}), \frac{\partial \Phi}{\partial y^\mu}(\frac{y^a}{\sigma}, \frac{z'}{\sigma^2}), \frac{\partial \Phi^\star}{\partial y^\mu}(\frac{y^a}{\sigma}, \frac{z'}{\sigma^2})]dx'dy'dz'. \tag{3.136}$$

ovvero introducendo le variabili $x^a = \sigma y^a$ e $z = \sigma^2 z'$[23] si ottiene

$$\begin{aligned} S' = \quad & \int L[\Phi(x^a, z), \Phi^\star(x^a, z), \frac{1}{\sigma}\frac{\partial \Phi}{\partial x^a}(x^a, z), \frac{1}{\sigma}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial x^a}(x^a, z), \\ & \frac{1}{\sigma^2}\frac{\partial \Phi}{\partial z}(x^a, z), \frac{1}{\sigma^2}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial z}(x^a, z)]\sigma^4 dxdydz. \end{aligned} \tag{3.137}$$

Se ora aggiungiamo anche lo *scaling* interno $\Phi(x, y, z) \to \sigma^{-d}\Phi(x, y, z)$ l'azione trasformata complessiva diviene

$$\begin{aligned} S' = \quad & \int L[\sigma^{-d}\Phi(x^a, z), \sigma^{-d}\Phi^\star(x^a, z), \sigma^{-d-1}\frac{\partial \Phi}{\partial x^a}(x^a, z), \\ & \sigma^{-d-1}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial x^a}(x^a, z), \sigma^{-d-2}\frac{\partial \Phi}{\partial z}(x^a, z), \sigma^{-d-2}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial z}(x^a, z)]\sigma^4 d^2x dz. \end{aligned} \tag{3.138}$$

Ora la trasformazione sarà di simmetria se accade

$$\begin{aligned} & \sigma^4 L[\sigma^{-d}\Phi(x^a, z), \sigma^{-d}\Phi^\star(x^a, z), \sigma^{-d-1}\frac{\partial \Phi}{\partial x^a}(x^a, z), \\ \sigma^{-d-1}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial x^a}(x^a, z), & \sigma^{-d-2}\frac{\partial \Phi}{\partial z}(x^a, z), \sigma^{-d-2}\frac{\partial \Phi^\star}{\partial z}(x^a, z)] \quad = \\ & L[\Phi(x^a, z), \Phi^\star(x^a, z), \frac{\partial \Phi}{\partial x^a}(x^a, z), \\ & \frac{\partial \Phi^\star}{\partial x^a}(x^a, z), \frac{\partial \Phi}{\partial z}(x^a, z), \frac{\partial \Phi^\star}{\partial z}(x^a, z)]. \end{aligned} \tag{3.139}$$

Se adesso ci riferiamo alla densità di Lagrangiana introdotta in 3.76, vediamo che la condizione 3.139 è soddisfatta se $d = \frac{4-2}{2} = 1$. Questo si ottiene analizzando le potenze di σ che fanno comparire i vari termini della densità di Lagrangiana 3.76. Per esempio il termine $\partial_a \Phi \partial^a \Phi^\star$ porta al prodotto di $\sigma^4 \sigma^{-2d-2}$ e così via per tutti gli altri termini in gioco. La condizione $d = 1$ ci garantisce l'invarianza della densità di Lagrangiana rispetto

[22] In realtà ciò che ci interessa è che la variazione dell'azione trasformata porti sempre alle stesse equazioni di Eulero-Lagrange. Da un punto di vista della dinamica due azioni portano alle stesse equazioni di Eulero-Lagrange a patto che esse differiscano per un termine di superficie, ovvero se le Lagrangiane relative differiscono per un termine di divergenza pura

[23] Si è indicato per comodità $x^a = (x, y)$ e $y^a = (x', y')$

alla coppia di trasformazioni in scala introdotte. Questa condizione però non è strettamente necessaria, poichè è ben noto che la dinamica di un sistema non cambia se la Lagrangiana viene moltiplicata complessivamente per un termine costante. In ogni caso l'analisi svolta ci ha confermato che l'equazione parassiale ammette la simmetria per invarianza in scala, risultato che avevamo già ottenuto precedentemente per altra via nella sezione 3.2. Infatti avevamo già osservato che i vettori 3.47 e 3.52 sono all'origine dello *scaling* per il campo ed agiscono, (mediante una loro combinazione lineare), su di una soluzione nota, indicata con Φ, producendo una nuova soluzione, che si scrive come

$$\tilde{\Phi}(x,y,z) = e^{-\sigma}\Phi(e^{\sigma}x, e^{\sigma}y, e^{2\sigma}z). \tag{3.140}$$

dove σ ha il ruolo del parametro della trasformazione. La domanda che ci si può porre ora è quale sia, se esiste, la grandezza conservata associata a questa simmetria del campo. A tale scopo, occorre applicare il teorema di Noether in una forma leggermente modificata, per tener conto della simmetria interna. In particolare alla corrente conservata J^{μ} va aggiunto un termine del tipo

$$\frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\Phi)}\frac{d\Phi^{\sigma}}{d\sigma}. \tag{3.141}$$

con $\Phi^{\sigma}(x,y,z) = e^{-\sigma}\Phi(x,y,z)$, che tenga conto anche del riscalamento del campo Φ stesso (cioè si deve considerare anche il contributo dato dalla simmetria interna). Volendo avere una corrente *osservabile* richiediamo che sia

$$J^{\mu} = v^{\nu}T^{\mu}_{\nu} + \frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\Phi)}\frac{d\Phi^{\sigma}}{d\sigma}|_{\sigma=0} + (\frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\Phi)}\frac{d\Phi^{\sigma}}{d\sigma}|_{\sigma=0})^{\star}. \tag{3.142}$$

dove v^{ν} sono le componenti del vettore caratteristico associato allo *scaling* sulle variabili indipendenti. Si trova agevolmente che

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 2z \end{pmatrix}. \tag{3.143}$$

(il vettore di Lie associato a questa trasformazione è $\mathbf{v} = x\partial_x + y\partial_y + 2z\partial_z$, formula 3.47). Effettuando i calcoli si ottiene

$$J^{\mu} = v^{\alpha}T^{\mu}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\Phi)}(-\Phi) + \frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\Phi^{\star})}(-\Phi^{\star}). \tag{3.144}$$

La conservazione della corrente implica $\partial_{\mu}J^{\mu} = 0$. Verifichiamo che ciò accada. Per farlo dobbiamo scrivere in modo esplicito le varie componenti della corrente. Per la J^{x} avremo

$$\begin{aligned} J^{x} &= v^{\alpha}T^{x}_{\alpha} + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_x\Phi)}(-\Phi) + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_x\Phi^{\star})}(-\Phi^{\star}) \\ &= xT^{x}_{x} + yT^{x}_{y} + 2zT^{x}_{z} + \partial_x\Phi^{\star}(-\Phi) + \partial_x\Phi(-\Phi^{\star}). \end{aligned} \tag{3.145}$$

mentre la componente J^y vale

$$\begin{aligned} J^y &= v^\alpha T^y_\alpha + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_y \Phi)}(-\Phi) + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_y \Phi^\star)}(-\Phi^\star) \\ &= xT^y_x + yT^y_y + 2zT^y_z + \partial_y \Phi^\star(-\Phi) + \partial_y \Phi(-\Phi^\star). \end{aligned} \tag{3.146}$$

ed infine per la componente J^z si ha

$$\begin{aligned} J^z &= v^\alpha T^z_\alpha + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z \Phi)}(-\Phi) + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_z \Phi^\star)}(-\Phi^\star) \\ &= xT^z_x + yT^z_y + 2zT^z_z + (-ik\Phi^\star)(-\Phi) + (+ik\Phi)(-\Phi^\star) \\ &= xT^z_x + yT^z_y + 2zT^z_z. \end{aligned} \tag{3.147}$$

Per la divergenza si ottiene

$$\begin{aligned} \partial_\mu J^\mu &= T^x_x + x\partial_x T^x_x + y\partial_x T^x_y + 2z\partial_x T^x_z - \Phi\partial^2_x\Phi^\star - \partial_x\Phi^\star\partial_x\Phi \\ &- \Phi^\star\partial^2_x\Phi - \partial_x\Phi\partial_x\Phi^\star + x\partial_y T^y_x + y\partial_y T^y_y + T^y_y + 2z\partial_y T^y_z \\ &- \Phi\partial^2_y\Phi^\star - \partial_y\Phi^\star\partial_y\Phi - \Phi^\star\partial^2_y\Phi - \partial_y\Phi\partial_y\Phi^\star + x\partial_z T^z_x \\ &+ y\partial_z T^z_y + 2z\partial_z T^z_z + 2T^z_z. \end{aligned} \tag{3.148}$$

La 3.148 si semplifica facendo uso delle leggi di conservazione già dimostrate, in particolare della 3.95,

$$\begin{aligned} \partial_\mu J^\mu &= x(\partial_x T^x_x + \partial_y T^y_x + \partial_z T^z_x) + y(\partial_x T^x_y + \partial_y T^y_y + \partial_z T^z_y) + 2z(\partial_x T^x_z \\ &+ \partial_y T^y_z + \partial_z T^z_z) + T^x_x + T^y_y + 2T^z_z - \Phi\partial^2_x\Phi^\star - \partial_x\Phi^\star\partial_x\Phi - \Phi^\star\partial^2_x\Phi \\ &- \partial_x\Phi\partial_x\Phi^\star - \Phi\partial^2_y\Phi^\star - \partial_y\Phi^\star\partial_y\Phi - \Phi^\star\partial^2_y\Phi - \partial_y\Phi\partial_y\Phi^\star \\ &= T^x_x + T^y_y + 2T^z_z - \Phi\partial^2_x\Phi^\star - \partial_x\Phi^\star\partial_x\Phi - \Phi^\star\partial^2_x\Phi \\ &- \partial_x\Phi\partial_x\Phi^\star - \Phi\partial^2_y\Phi^\star - \partial_y\Phi^\star\partial_y\Phi - \Phi^\star\partial^2_y\Phi - \partial_y\Phi\partial_y\Phi^\star. \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.149}$$

dove nella 3.149 si è fatto uso della forma esplicita delle T^x_x, T^y_y (la T^z_z si è già detto coincidere con la densità di Hamiltoniana H), ovvero

$$T^x_x = -\partial_x\Phi\partial_x\Phi^\star + \partial_y\Phi\partial_y\Phi^\star + ik\Phi\partial_z\Phi^\star - ik\Phi^\star\partial_z\Phi. \tag{3.150}$$

$$T^y_y = -\partial_y\Phi\partial_y\Phi^\star + \partial_x\Phi\partial_x\Phi^\star + ik\Phi\partial_z\Phi^\star - ik\Phi^\star\partial_z\Phi. \tag{3.151}$$

nonchè delle equazioni parassiali 3.65-3.66. Verificato che effettivamente la corrente 3.144 si conserva, sappiamo che, effettuando le solite ipotesi sull'andamento delle correnti sui bordi della superficie all'infinito, la carica conservata si associa alla sola componente J^z. Ovverosia vale la condizione

$$\partial_z \int_{S_\infty} J^z dxdy = 0. \tag{3.152}$$

quindi la grandezza $\int_{S_\infty} J^z dxdy$ è una carica conservata per il campo. La sua forma esplicita risulta essere

$$\begin{aligned} Q^z &= \int_{S_\infty} (xT_x^z + yT_y^z + 2zT_z^z)dxdy = \int_{S_\infty} (x^a T_a^z + 2zT_z^z)dxdy \\ &= \int_{S_\infty} (\mathbf{r}_\perp \cdot \mathbf{g} + 2z\mathrm{H})dxdy. \end{aligned} \tag{3.153}$$

dove si è fatto uso della definizione di densità di momento $\mathbf{g}$. La 3.153 è ciò che stavamo cercando. Si tratta della carica conservata associata alla simmetria di invarianza in scala per l'ottica parassiale. Se ricordiamo che $\int_{S_\infty} \mathrm{H}dxdy = \mathrm{E}$ è l'energia del campo, si deduce che l'integrale

$$\int_{S_\infty} (\mathbf{r}_\perp \cdot \mathbf{g})dxdy. \tag{3.154}$$

può al più essere pari a $-2z\mathrm{E} + C$ con C costante generica.
In chiusura è bene sottolineare che l'interesse nell'avere la forma esplicita per queste grandezze conservate può essere legato a diverse ragioni. Infatti oltre a possedere un intrinseco fascino, che da sempre ha attratto la comunità scientifica, esse possono trovare un utile impiego nelle simulazioni numeriche, per testare la bontà dei risultati ottenuti oppure si possono utilizzare per ricavare informazioni su di un campo del quale non si abbia conoscenza completa[24][55]-[61], un po' come si fa in Meccanica, dove si risale alle caratteristiche cinematiche possedute in ogni istante da un corpo sfruttando la conservazione della quantità di moto, dell'energia, del momento angolare e così via.

[24] Come esempio si pensi ai cosiddetti problemi di *phase retrieval* in cui dalla sola ampiezza del campo si cerca di ricostruire l'andamento della fase su ogni piano. Tradizionalmente l'informazione di fase viene ottenuta da misure di ampiezza mediante tecniche interferometriche, ma di recente è stata ricavata anche a partire dalla informazione di intensità di un fascio luminoso mediante l'equazione del trasporto 3.99.

Capitolo 4

Fasci di Lorentz

Nel capitolo precedente abbiamo studiato in dettaglio i campi luminosi pseudo-nondiffrangenti ad inviluppo Gaussiano, tra i quali si annovera anche il fascio Gaussiano fondamentale, mettendo in evidenza lo stretto legame che esiste tra la Gaussiana e l'ottica parassiale, dovuto ad una cosiddetta simmetria nascosta dell'equazione 1.43. Il fascio Gaussiano è importante però non soltanto per questi intriganti aspetti di simmetria, ma anche perchè esso rappresenta un buon modello matematico per la radiazione emessa dalla gran parte delle sorgenti laser. Un laser è un oscillatore ottico che, come tutti gli oscillatori, è formato da due elementi costituenti fondamentali: un amplificatore (nel caso del laser costituito dal mezzo attivo in condizioni di inversione di popolazione) ed un blocco di controreazione (per il laser rappresentato dalla cavità elettromagnetica) [17], [41], [62], [63], [64]. La cavità elettromagnetica è volutamente progettata con perdite (se così non fosse non si riuscirebbe a tirare fuori un po' di fotoni per dar luogo al fascio laser così utile in molte ricerche e/o applicazioni) ed è essa che costruisce la forma del campo (all'interno della cavità e fuori). Nel caso di risonatore stabile a specchi sferici, una famiglia di soluzioni di campo è data dai fasci di Hermite-Gauss di ordine (m, n), $\mathrm{HG}_{m,n}$ di cui il fascio Gaussiano è il rappresentante di ordine più basso. Quindi un laser, con un risonatore a specchi sferici, produce come modo fondamentale un modo HG_{00} che è un fascio Gaussiano. In realtà, tale modello in alcuni casi fallisce nel descrivere la radiazione emessa da un laser, come accade, per esempio, per alcuni dispositivi a semiconduttore. In particolare alcuni lasers a doppia eterogiunzione (DH) del tipo $Ga_{1-x}Al_xAs$, dotati di regioni attive dell'ordine di $0.1\mu m$, emettono campi con elevata divergenza angolare, per i quali una descrizione Gaussiana non può essere utilizzata neanche come modello di prima approssimazione. La ragione di ciò si può giustificare osservando che il fascio Gaussiano è un campo a minima incertezza, ovvero esso ha il minimo prodotto congiunto estensione spaziale-divergenza angolare e quindi mal si presta a descrivere una radiazione che, a parità di estensione spaziale, sia dotata di una note-

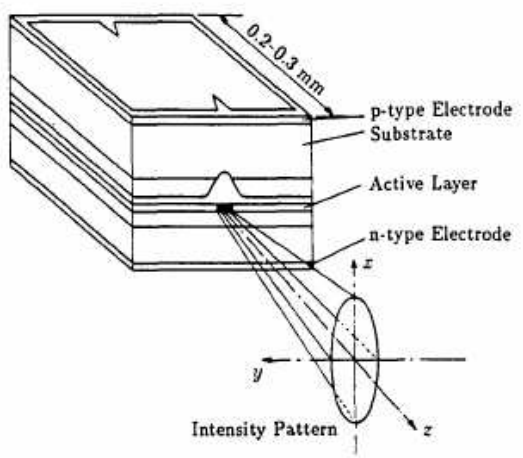

Figura 4.1: Tipico diodo laser a giunzione

vole divergenza angolare. In figura 4.1 si riporta un tipico diodo laser a giunzione con la relativa radiazione emessa. In particolare per questi dispositivi il campo mostra una simmetria Cartesiana, dunque una separabilità in coordinate rettangolari, con una divergenza più pronunciata in direzione ortogonale al piano di giunzione. La cosa interessante è che alcuni autori hanno osservato sperimentalmente [65]-[66] che all'uscita del laser il campo viene ben descritto da un modello di tipo Lorentziano (figura 4.2), il che rappresenta uno stimolo ad investigare il comportamento di questo tipo di fascio durante la propagazione libera . Accanto a queste considerazioni di tipo applicativo, c'è anche da dire che la ricerca di nuove soluzioni di campo, note in forma analitica, è sempre interessante, soprattutto quando si riesce, come vedremo, a trovare campi fisicamente realizzabili dotati di un inviluppo differente dall'onnipresente modello Gaussiano. A tale proposito si introdurranno, nella prossima sezione, i cosiddetti fasci di Lorentz, per i quali si riesce a dare la propagazione parassiale in forma chiusa. Successivamente si vedrà come essi possono essere una base per descrivere la propagazione di una classe più ampia di soluzioni, evidenziandone caratteristiche generali e possibili applicazioni.

4.1 Propagazione parassiale di un fascio di Lorentz

Supponiamo di avere, sul piano sorgente $(x, y, z = 0)$, la seguente distribuzione scalare di campo

$$V_0(x, y) = \frac{A}{w_x w_y} \frac{1}{[1 + (x/w_x)^2]} \frac{1}{[1 + (y/w_y)^2]}. \tag{4.1}$$

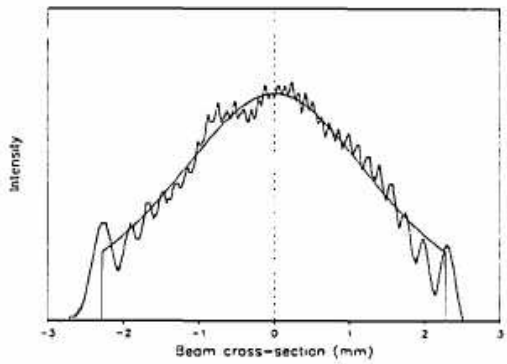

Figura 4.2: Profilo di intensità (misurato) di un fascio prodotto da un diodo laser collimato

dove A è un valore costante e w_x e w_y sono due parametri che per ora supporremo reali. La 4.1 ha la forma di una Lorentziana in un piano (che, nel caso monodimensionale, è anche nota come *versiera di Agnesi*) in cui w_x e w_y regolano la larghezza della curva. In effetti la Lorentziana è una curva a forma di campana molto nota, soprattutto a chi fa spettroscopia, poichè essa è il modello matematico più semplice che descrive le righe spettrali di sistemi fisici che rispondano ad eccitazioni esterne con andamenti di rilassamento di tipo esponenziale decrescente. A partire dal campo (4.1) si desidera ricavare la forma assunta durante propagazione nello spazio libero. Per far questo si utilizza lo sviluppo in onde piane. In particolare si passa al dominio di Fourier, e si calcola lo spettro su $z = 0$:

$$\begin{aligned} A_0(p,q) &= \int_\infty \int_\infty \frac{A}{w_x w_y} \frac{1}{[1+(x/w_x)^2]} \frac{1}{[1+(y/w_y)^2]} e^{-2i\pi px} e^{-2\imath\pi qy} dxdy \\ &= \frac{A}{w_x w_y} \int_\infty \frac{1}{[1+(x/w_x)^2]} e^{-2i\pi px} dx \int_\infty \frac{1}{[1+(y/w_y)^2]} e^{-2i\pi qy} dy \\ &= A\pi^2 e^{-2\pi|p|w_x} e^{-2\pi|q|w_y}. \end{aligned} \tag{4.2}$$

dove al solito $A_0(p,q)$ è lo spettro complesso e p e q sono le variabili coniugate alle variabili spaziali x e y rispettivamente. Una volta che sia noto lo spettro di onde piane su $z = 0$ lo possiamo calcolare su di un piano (x, y) secondo la 1.17, ovverosia abbiamo per lo spettro $A_z(p,q)$

$$A_z(p,q) = A_0(p,q)e^{2i\pi mz} = A\pi^2 e^{-2\pi|p|w_x} e^{-2\pi|q|w_y} e^{2i\pi mz}. \tag{4.3}$$

dove sappiamo che m vale

$$m = \sqrt{(1/\lambda^2 - p^2 - q^2)}. \tag{4.4}$$

Nella parte dedicata ai modelli matematici e le trattazioni approssimate in ottica abbiamo introdotto l'ottica di Fresnel agendo direttamente sull'integrale di diffrazione di Rayleigh-Sommerfeld 1.23, ma è possibile operare anche direttamente sullo spettro del campo, ovvero nel dominio di Fourier. Infatti, osservando la (4.2), e ricordando che se i valori di w_x and w_y sono sufficientemente più grandi della lunghezza d'onda λ, il contributo principale al campo viene fornito dalle onde omogenee componenti la cui ampiezza è diversa da zero solo su di un intorno dell'origine del piano trasformato (p, q), siamo autorizzati ad effettuare l'espansione

$$m = \sqrt{(\frac{1}{\lambda^2} - p^2 - q^2)} \simeq \frac{1}{\lambda} - \frac{(p^2 + q^2)\lambda}{2}. \tag{4.5}$$

troncata ai primi due termini della serie, di modo che lo spettro (4.3) divenga

$$A_z^{parax}(p, q) = A\pi^2 e^{-2\pi|p|w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{-2\pi|q|w_y - i\pi\lambda z q^2}\ e^{ikz}. \tag{4.6}$$

Una volta noto lo spettro in z possiamo ricavare il campo mediante trasformazione inversa

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \int_\infty \int_\infty [A\pi^2 e^{ikz} e^{-2\pi|p|w_x - i\pi\lambda z p^2} \times \\ &\times\ e^{(-2\pi|q|w_y - i\pi\lambda z q^2)}] e^{i2\pi(px+qy)} dpdq \\ &= A\pi^2 e^{ikz} \int_\infty e^{-2\pi|p|w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{i2\pi px} dp \times \\ &\times \int_\infty e^{-2\pi|q|w_y - i\pi\lambda z q^2} e^{i2\pi qy} dq. \end{aligned} \tag{4.7}$$

E' importante osservare che l'approssimazione parassiale produce uno spettro $A_z^{parax}(p, q)$ fattorizzato in due parti, ciascuno dei quali dipendente soltanto da una delle variabili di Fourier; ciò non accade per lo spettro esatto che mantiene mescolate le due dipendenze a causa della presenza del termine $e^{i2\pi mz}$. Ne segue che anche il campo complesso $V(x, y, z)$ si mantiene in una forma fattorizzata nelle variabili x e y. Si ha dunque una simmetria Cartesiana. Per ottenere la soluzione della (4.7) occorre risolvere l'integrale

$$I = \int_\infty e^{-2\pi|p|w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{i2\pi px} dp. \tag{4.8}$$

che si può riscrivere come

$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 = \\ &= \int_0^\infty e^{-2\pi p w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{i2\pi px} dp + \\ &+ \int_{-\infty}^0 e^{2\pi p w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{i2\pi px} dp. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Per il primo dei due integrali si ha

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty e^{-2\pi p w_x - i\pi\lambda z p^2} e^{i2\pi p x} dp = \\ &= e^c \int_0^\infty e^{-(ap+b)^2} dp = \frac{e^c}{a}\int_b^\infty e^{-s^2} ds = \\ &= \frac{e^c}{a}[\int_0^\infty e^{-s^2} ds - \int_0^b e^{-s^2} ds] = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{e^{[\pi(w_x - ix)^2/i\lambda z]}}{\sqrt{i\pi\lambda z}}\{1 - \mathrm{erf}[\pi(w_x - ix)/\sqrt{i\pi\lambda z}]\}. \end{aligned} \tag{4.10}$$

dove abbiamo definito le variabili ausiliarie

$$a^2 = i\pi\lambda z \tag{4.11}$$

$$b = \pi(w_x - ix)/a \tag{4.12}$$

$$c = b^2 \tag{4.13}$$

$$s = ap + b. \tag{4.14}$$

La $\mathrm{erf}(x)$ è la funzione di errore definita come

$$\mathrm{erf}(x) = (2/\sqrt{\pi})\int_0^x e^{(-s^2)} ds. \tag{4.15}$$

[67]. Per l'altro integrale della (4.9) si arriva a soluzione osservando che esso è uguale a quello appena calcolato se si va a sostituire x con $-x$. Utilizzando questi risultati si ottiene, infine,

$$\begin{aligned} V(x,y,z) &= \frac{A\pi^2}{4}\frac{e^{ikz}}{i\lambda z}[V_x^+(x,z) + V_x^-(x,z)] \\ &\times [V_y^+(y,z) + V_y^-(y,z)]. \end{aligned} \tag{4.16}$$

dove

$$V_\eta^\pm(\eta, z) = e^{[\pi(w_\eta \pm i\eta)^2/i\lambda z]}\{1 - \mathrm{erf}[\pi(w_\eta \pm i\eta)/\sqrt{i\pi\lambda z}]\}. \tag{4.17}$$

e $\eta = x, y$. Questo rappresenta il risultato che volevamo ottenere, ovvero l'espressione in forma chiusa per una distribuzione di partenza di tipo Lorentziano [42]. Vediamo in dettaglio alcune proprietà di questo campo. Innanzitutto ci aspettiamo che la forma del campo cambi in ragione della diffrazione agente sul fascio (del resto il campo non è a sezione invariante), anche se è comunque possibile introdurre un intervallo in z entro cui gli effetti della diffrazione sono trascurabili. Per ottenere l'espressione esplicita per tale valore in z effettuiamo una valutazione del campo per valori di z prossimi al piano di partenza $(x, y, z = 0)$. Ciò si può fare espandendo la funzione errore $\mathrm{erf}(x)$ per elevati valori del proprio argomento

$$\mathrm{erf}(s) \approx 1 + \frac{s}{\pi}e^{-s^2}\sum_{k=1}^\infty (-1)^k \frac{\Gamma(k - 1/2)}{s^{2k}}. \tag{4.18}$$

dove $|s| >> 1$, $-\pi/2 < \arg(s) < \pi/2$ e Γ è la funzione gamma [67]. Mediante questa espansione è facile verificare che la (4.16) si riduce alla (4.1). Infatti si ottiene, conservando solo il primo termine dello sviluppo

$$\begin{aligned} V(x,y,0) &= \frac{A\pi^2}{4}\lim_{z\to 0}\frac{1}{i\lambda z}[V_x^+(x,z)+V_x^-(x,z)][V_y^+(y,z)+V_y^-(y,z)] = \\ &= \frac{A\pi^2}{4}\lim_{z\to 0}\frac{1}{i\lambda z}[\frac{\Gamma(1/2)\sqrt{i\lambda z}}{\sqrt{\pi}\pi(w_x-ix)}+\frac{\Gamma(1/2)\sqrt{i\lambda z}}{\sqrt{\pi}\pi(w_x+ix)}]\times \\ &\quad \times[\frac{\Gamma(1/2)\sqrt{i\lambda z}}{\sqrt{\pi}\pi(w_y-iy)}+\frac{\Gamma(1/2)\sqrt{i\lambda z}}{\sqrt{\pi}\pi(w_y+iy)}] = \\ &= \frac{A\pi^2}{4}[\frac{1}{w_x-ix}+\frac{1}{w_x+ix}][\frac{1}{w_y-iy}+\frac{1}{w_y+iy}] = \\ &= \frac{A}{w_x w_y}\frac{1}{[1+(x/w_x)^2]}\frac{1}{[1+(y/w_y)^2]}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

(si ricordi che vale $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$). Per trovare l'intervallo *diffraction-free* occore valutare per quali valori di z il secondo termine dello sviluppo, nella espansione della funzione Γ, sarà trascurabile rispetto al primo. Effettuando i conti, ciò porta alla condizione

$$\frac{\Gamma(1/2)}{|\pi(w_\eta \pm i\eta)/\sqrt{i\pi\lambda z}|^2} >> \frac{\Gamma(3/2)}{|\pi(w_\eta \pm i\eta)/\sqrt{i\pi\lambda z}|^4}. \tag{4.20}$$

dove ancora $\eta = x, y$. La (4.20) conduce a

$$\Gamma(1/2) >> \Gamma(3/2)\frac{\lambda}{\pi w^2}z. \tag{4.21}$$

e finalmente (si ricordi che risulta $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$) si arriva alla valutazione dell'intervallo in z cercato

$$z_R = \frac{2\pi w^2}{\lambda}. \tag{4.22}$$

dove nella (4.21) abbiamo posto $w_x = w_y = w$ per semplificare l'analisi. Se non si pone questa condizione esisteranno due differenti intervalli *diffraction-free*, uno per l'asse x e l'altro per l'asse y. In figura (4.3) si riporta l'andamento del modulo dell'ampiezza del campo valutata a differenti distanze dal piano di partenza. Come si nota, a distanze sufficientemente minori di z_R l'effetto della diffrazione è trascurabile. In definitiva la z_R rappresenta la distanza di Rayleigh.

Prima di chiudere questa sezione osserviamo che, in virtù della proprietà 3.55, sappiamo che esistono anche i campi di Lorentz-Gauss la cui espressione è

$$V^*(x,y,z) = \left[V_x^+(\frac{x}{1+iz/L},\frac{z}{1+iz/L})+V_x^-(\frac{x}{1+iz/L},\frac{z}{1+iz/L})\right]$$

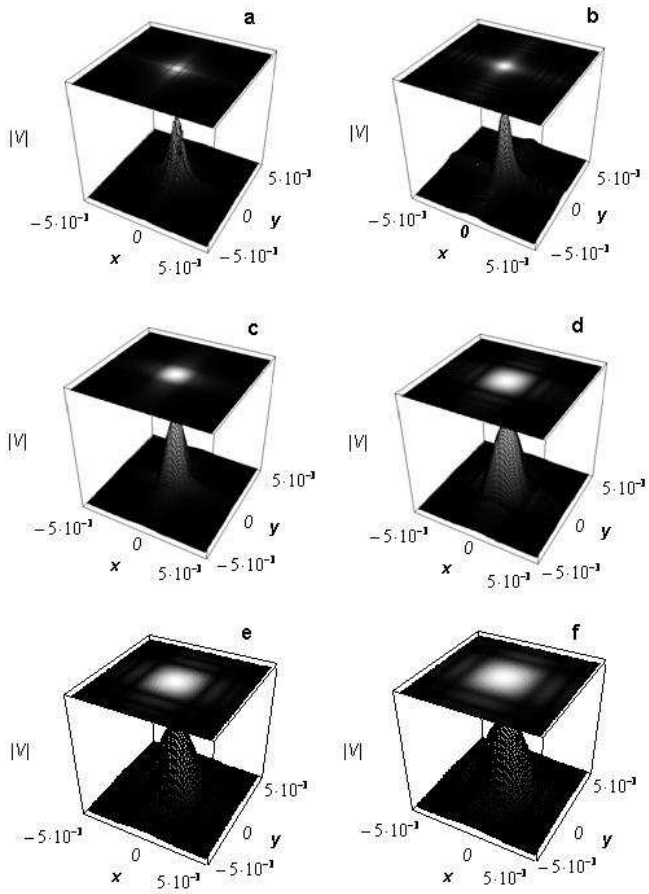

Figura 4.3: Modulo del fascio di Lorentz valutato su: a) piano sorgente $z = 0$ b) $z = 0.1z_R$ c) $z = 0.5z_R$ d) $z = z_R$ e) $z = 1.5z_R$ f) $z = 2z_R$. I parametri del campo sono scelti come segue: $\lambda = 0.6328\mu m$, $w_x = w_y = w = 10^3\lambda$. $z_R = 2\pi w^2/\lambda = 3.976m$ [42]

$$\times \quad \left[V_y^+(\frac{y}{1+iz/L},\frac{z}{1+iz/L})+V_y^-(\frac{y}{1+iz/L},\frac{z}{1+iz/L})\right]\times$$
$$\times \quad \frac{A\pi^2}{4}\frac{e^{ikz}}{i\lambda z}e^{-\frac{x^2+y^2}{w_0^2(1+iz/L)}}. \tag{4.23}$$

e la cui forma dipende dalla scelta dei valori w_x, w_y, w_0 e L. In particolare se si sceglie $w_0 < w_x, w_y$, si ottiene un campo che si comporta come un fascio di Lorentz in prossimità dell'asse z e come un fascio Gaussiano sufficientemente lontano da z. Mentre se poniamo $L = z_R$, si ottiene un campo di Lorentz-Gauss molto più confinato attorno all'asse z rispetto ad un semplice campo di Lorentz.

4.2 Fasci super-Lorentziani

Nella sezione precedente abbiamo ricavato l'espressione, lungo un piano qualunque, di una distribuzione di campo che in un certo piano di partenza aveva forma Lorentziana. In particolare essa vedeva come elementi costituenti due funzioni, la V_η^+ e la V_η^-, con $\eta = x, y$. Se riscriviamo il campo di Lorentz sul piano $(x, y, 0)$ come segue

$$\begin{aligned} V_0(x,y) &= \frac{A}{w_x w_y}\frac{1}{[1+(x/w_x)^2]}\frac{1}{[1+(y/w_y)^2]} \\ &= \frac{A}{w_x w_y}\left[\frac{1}{1+ix/w_x}+\frac{1}{1-ix/w_x}\right] \\ &\times \left[\frac{1}{1+iy/w_y}+\frac{1}{1-iy/w_y}\right]. \end{aligned} \tag{4.24}$$

si mette in evidenza che, in definitiva, ciò che si è trovato nel paragrafo precedente è la propagazione di un generico termine del tipo

$$\frac{1}{1\pm i\eta/w_\eta}, \quad \eta = x, y \tag{4.25}$$

che possiamo chiamare termine di *polo semplice* costituente il campo. Allora ha senso chiedersi se si possa esprimere la propagazione in forma chiusa di una generalizzazione della 4.1, in cui compaia un numero arbitrario di poli. A tal proposito si supponga di avere, sempre sul piano $z = 0$, la seguente distribuzione di campo:

$$V(x,y,0) = g(x)h(y)\prod_{m=1}^{M}\frac{c_m}{(x^2+\alpha_m^2)}\prod_{n=1}^{N}\frac{d_n}{(y^2+\beta_n^2)}. \tag{4.26}$$

dove c_m e d_n sono dei coefficienti costanti, $g(x)$ e $h(y)$ delle funzioni reali *well-behaved* che, a meno di alcune ipotesi fondamentali che si faranno per esse, e sulle quali si dirà tra breve, possono essere scelte in modo totalmente

arbitrario. I coefficienti α_m, β_n possono anche assumere valori complessi, ma per semplicità ammetteremo che in questo caso compaiano anche i rispettivi valori complessi coniugati, volendo mantenere la 4.26 a valori reali. Per semplificare la notazione, trattandosi di campi a simmetria Cartesiana, ci si limiterà a studiare il caso bidimensionale (2D), e quindi si ometterà la dipendenza dalla variabile y. Quindi il fascio luminoso 2D, cui ci riferiremo, è il seguente (sulla linea $z = 0$):

$$V(x,0) = g(x) \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{(x^2 + \alpha_m^2)}. \tag{4.27}$$

Alla luce di quanto detto in precedenza possiamo pensare al campo 4.27 come composto da un certo numero di poli complessi coniugati, che per semplicità supporremo differenti gli uni dagli altri, moltiplicati per la funzione $h(x)$ priva di singolarità per ipotesi. A causa della forma del denominatore, possiamo chiamare tale tipo di campo come fascio super-Lorentziano [68]. Si possono separare i termini pari da quelli dispari nella $g(x)$

$$g(x) = g_o(x) + g_e(x) \tag{4.28}$$

dove

$$g_o(x) = \frac{g(x) - g(-x)}{2} \tag{4.29}$$

$$g_e(x) = \frac{g(x) + g(-x)}{2}. \tag{4.30}$$

in modo che la 4.27 risulti pari a

$$V(x,0) = V_o(x,0) + V_e(x,0). \tag{4.31}$$

con

$$V_o(x,0) = g_o(x) \prod_{m=1}^{N} \frac{c_m}{(x^2 + \alpha_m^2)} \tag{4.32}$$

$$V_e(x,0) = g_e(x) \prod_{m=1}^{N} \frac{c_m}{(x^2 + \alpha_m^2)}. \tag{4.33}$$

Vogliamo adesso trovare la propagazione parassiale del campo 4.31 nello spazio libero. Da un punto di vista teorico tale problema ha già una soluzione. Infatti la propagazione parassiale di un campo si può ottenere sviluppandolo in termini di una tra le tre famiglie complete di modi ortogonali oggi note, ovvero i fasci di Hermite-Gauss, di Laguerre-Gauss e Ince-Gauss [69]-[70], ottenuti risolvendo il problema parassiale 3.1 in coordinate Cartesiane, circolari-cilindriche e ellittico-cilindriche, rispettivamente. Per esempio,

prendendo i fasci di Hermite-Gauss come base, ed indicando con $f(x, y, z)$ un generico campo parassiale, si ha

$$f(x, y, 0) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_{mn} \mathrm{HG}_{mn}(x, y, 0). \tag{4.34}$$

dove

$$c_{mn} = \int \int_{\infty} f(x, y, 0) \mathrm{HG}_{mn}(x, y, 0) dx dy. \tag{4.35}$$

Il valore assunto dal campo in ogni punto (x, y, z) si otterrebbe poi applicando le ben note leggi di propagazione dei fasci di Hermite-Gauss. Il problema di tale metodo sta innanzitutto nella difficoltà che si può incontrare nel dare la forma analitica ai coefficienti di sviluppo 4.35; in secondo luogo, ammesso che si sappia trovare l'epressione per i $c_{m,n}$, la 4.34 è una somma infinita di termini che, in qualsiasi pratico utilizzo, deve essere troncata. Nella prossima sezione si mostrerà che un campo super-Lorentziano si può esprimere come una somma *finita* di termini costituenti un fascio di Lorentz semplice. Una volta fatto questo, si passerà successivamente a mostrare alcune proprietà di tale famiglia di campi, mostrando in particolare che mediante essi si può definire un nuovo insieme di soluzioni parassiali ortogonali tra loro, insieme costituito però da un numero finito di elementi.

4.3 Propagazione di un fascio super-Lorentziano

Si desidera trovare l'espressione in forma chiusa del campo 4.27 dopo propagazione libera. Per far questo troviamo l'espressione per lo spettro angolare in $z = 0$, e poi lo calcoliamo su $z \neq 0$ aggiungendo il termine di fase quadratico tipico della propagazione di Fresnel (si veda in 4.6). Dopo di che si otterrà il campo $V(x, z)$ per inversione di Fourier. Per lo spettro $A_0(k_x)$ abbiamo

$$A_0(k_x) = \int_{-\infty}^{\infty} V(x, 0) e^{-ik_x x} dx. \tag{4.36}$$

Supporremo ora che tutte le funzioni reali che incontreremo siano prolungabili nel piano complesso in modo tale che, se poniamo $x = is$, con $s = s_r + is_i$ variabile complessa, si ottenga

$$A_0(k_x) = \int_{+i\infty}^{-i\infty} V(is, 0) e^{k_x s} i ds. \tag{4.37}$$

ovvero

$$A_0(k_x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi V(is, 0) e^{k_x s} ds. \tag{4.38}$$

Nella 4.38 riconosciamo la trasformata inversa di Laplace della funzione $2\pi V(is, 0)$. Integrali del tipo 4.38 possono essere valutati, sotto alcune ipotesi, mediante il Teorema dei Residui. Infatti supponiamo di avere l'integrale,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} f(s) e^{ts} ds. \tag{4.39}$$

con il parametro $t > 0$ e $c \in \Re$. Se ora scegliamo $c = 0$ e consideriamo un cammino $\gamma(R)$ di raggio R centrato nell'origine del piano complesso e giacente nel semipiano sinistro $Re(s) \leq 0$, ammetteremo soddisfatta la seguente condizione

Lemma di Jordan modificato: *Se $t \geq 0$ e vale uniformemente*

$$\lim_{|s| \to +\infty} f(s) = 0. \tag{4.40}$$

allora risulta

$$\lim_{R \to +\infty} \int_{\gamma} e^{ts} f(s) ds = 0. \tag{4.41}$$

(Per $t < 0$ la curva γ deve giacere nel semipiano $Re(s) \geq 0$)[1].

L'importanza del lemma risiede nel fatto che, se la funzione $f(s)$ è olomorfa nel semipiano $Re(s) \leq 0$ tranne che in un numero finito di poli (semplici o multipli) tutti giacenti nel semipiano $Re(s) \leq 0$, otteniamo

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} f(s) e^{ts} ds = \sum_{m=1}^{M} Res_m. \tag{4.42}$$

dove M è il numero di poli e Res_m indica il residuo della funzione $e^{ts} f(s)$ nel polo m-esimo. La condizione appena introdotta limita la classe delle funzioni $g(x)$ a quelle per cui vale, uniformemente,

$$\lim_{|s| \to +\infty} g(is) \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{[(is)^2 + \alpha_m^2]} = 0. \tag{4.43}$$

Tornando all'integrale 4.38, otteniamo quindi

$$\begin{aligned}
A_0(k_x) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g(is) \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{[(is)^2 + \alpha_m^2]} e^{k_x s} ds \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi [g_o(is) + g_e(is)] \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{[(is)^2 + \alpha_m^2]} e^{k_x s} ds \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_o(is) \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{[(is)^2 + \alpha_m^2]} e^{k_x s} ds \\
&+ \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_e(is) \prod_{m=1}^{M} \frac{c_m}{[(is)^2 + \alpha_m^2]} e^{k_x s} ds
\end{aligned}$$

[1] Per approfondimenti sul lemma di Jordan si rimanda a qualunque testo sull'analisi complessa, come per esempio [71]

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_o(is)\prod_{m=1}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{k_x s}ds \\
&+ \frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_e(is)\prod_{m=1}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{k_x s}ds. \qquad (4.44)
\end{aligned}
$$

Affinchè tale integrale non diverga, occorre integrare sui poli a parte reale negativa quando $k_x > 0$ e su quelli a parte reale positiva quando $k_x < 0$. In via preliminare osserviamo che, a seguito delle ipotesi fatte, il campo 4.27 possiede solo coppie di poli complessi coniugati; ciò implica che il prolungamento analitico avrà soltanto coppie di poli reali, simmetrici rispetto all'asse immaginario. Separando la parte pari dello spettro da quella dispari si può scrivere

$$
A_0^{(o)}(k_x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_o(is)\prod_{m=1}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{k_x s}ds \qquad (4.45)
$$

$$
A_0^{(e)}(k_x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty} 2\pi g_e(is)\prod_{m=1}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{k_x s}ds. \qquad (4.46)
$$

dove si è posto

$$
A_0(k_x) = A_0^{(o)}(k_x) + A_0^{(e)}(k_x). \qquad (4.47)
$$

Ora, senza alcuna perdita di generalità, possiamo considerare come positivi tutti i valori dei coefficienti α_i, cioè $\alpha_i \geq 0$. Per il calcolo dei residui della funzione 4.45 occorre considerare l'n-ma coppia di poli $(\alpha_n\ ;-\alpha_n)$, con $-\alpha_n$ per $k_x > 0$ e α_n per $k_x < 0$. Quindi per lo spettro 4.47 si ha, per la parte pari e dispari e per $k_x > 0$

$$
\begin{aligned}
Res_n &= \lim_{s\to-\alpha_n} 2\pi g_\eta(is)\frac{c_n(s+\alpha_n)}{(\alpha_n-s)(\alpha_n+s)}\prod_{\substack{m\neq n\\ m=1}}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{k_x s} \\
&= \frac{A_n\pi}{\alpha_n}g_\eta(-i\alpha_n)e^{-k_x\alpha_n}. \qquad (4.48)
\end{aligned}
$$

per $k_x < 0$

$$
\begin{aligned}
Res_n &= -\lim_{s\to+\alpha_n} 2\pi g_\eta(is)\frac{c_n(s-\alpha_n)}{(\alpha_n-s)(\alpha_n+s)}\prod_{\substack{m\neq n\\ m=1}}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-s^2}e^{(k_x s)} \\
&= \frac{A_n\pi}{\alpha_n}g_\eta(i\alpha_n)e^{k_x\alpha_n}. \qquad (4.49)
\end{aligned}
$$

dove $\eta = (o, e)$ indica la parità. Nelle 4.48, 4.49 abbiamo definito le quantità A_n come segue

$$
A_n = c_n\prod_{\substack{m\neq n\\ m=1}}^{M}\frac{c_m}{\alpha_m^2-\alpha_n^2}. \qquad (4.50)
$$

Definendo inoltre le grandezze $A_0^{(o,n)}(k_x)$ e $A_0^{(e,n)}(k_x)$ come

$$A_0^{(o,n)}(k_x) = \begin{cases} -A_n \pi g_o(i\alpha_n) e^{(-k_x \alpha_n)}/\alpha_n, & k_x > 0 \\ A_n \pi g_o(i\alpha_n) e^{(k_x \alpha_n)}/\alpha_n, & k_x < 0. \end{cases} \tag{4.51}$$

$$A_0^{(e,n)}(k_x) = \begin{cases} A_n \pi g_e(i\alpha_n) e^{(-k_x \alpha_n)}/\alpha_n, & k_x > 0 \\ A_n \pi g_e(i\alpha_n) e^{(k_x \alpha_n)}/\alpha_n, & k_x < 0 \end{cases} \tag{4.52}$$

in cui abbiamo sfruttato le ben note proprietà di simmetria di $g_o(x)$ e $g_e(x)$ ovvero $g_o(-x) = -g_o(x)$ e $g_e(-x) = g_e(x)$, lo spettro 4.47 si può scrivere come

$$A_0(k_x) = \sum_{m=1}^{M} [A_0^{(o,m)}(k_x) + A_0^{(e,m)}(k_x)] \tag{4.53}$$

con

$$A_0^{(o)}(k_x) = \sum_{m=1}^{M} A_0^{(o,m)}(k_x) \tag{4.54}$$

$$A_0^{(e)}(k_x) = \sum_{m=1}^{M} A_0^{(e,m)}(k_x). \tag{4.55}$$

$$\tag{4.56}$$

Conoscendo adesso lo spettro in $z = 0$ possiamo calcolarlo su $z \neq 0$ inserendo lo *shift* di fase quadratico tipico dell'approssimazione di Fresnel

$$A_z(p) = A_0(p) e^{-i\pi\lambda z p^2} e^{ikz}. \tag{4.57}$$

in cui $p = k_x(2\pi)^{-1}$. Infine, una volta noto lo spettro in z, possiamo calcolare, mediante trasformata inversa di Fourier, il campo scalare

$$\begin{aligned} V(x,z) &= I_1 + I_2 \\ &= e^{ikz} \sum_{m=1}^{M} \{ \int_{-\infty}^{\infty} [A_0^{(o,m)}(p) + A_0^{(e,m)}(p)] \\ &\times \; e^{-i\pi\lambda z p^2} e^{2i\pi p x} dp \}. \end{aligned} \tag{4.58}$$

Effettuando i conti si ottiene

$$\begin{aligned} I_1 &= e^{ikz} \sum_{m=1}^{M} \int_{-\infty}^{\infty} A_0^{(o,m)}(p) e^{-i\pi\lambda z p^2} e^{2i\pi p x} dp \\ &= e^{ikz} \sum_{m=1}^{M} [\int_{-\infty}^{0} \frac{A_m}{\alpha_m} \pi g_o(i\alpha_m) e^{2\pi p \alpha_m} e^{-i\pi\lambda z p^2} e^{2i\pi p x} dp \\ &- \int_{0}^{\infty} \frac{A_m}{\alpha_m} \pi g_o(i\alpha_m) e^{-2\pi p \alpha_m} e^{-i\pi\lambda z p^2} e^{2i\pi p x} dp] \\ &= \frac{e^{ikz}}{2\sqrt{i\lambda z}} \sum_{m=1}^{M} \frac{A_m \pi}{\alpha_m} g_o(i\alpha_m) [V_x^{(+,m)}(x,z) - V_x^{(-,m)}(x,z)]. \end{aligned} \tag{4.59}$$

e

$$
\begin{aligned}
I_2 &= e^{ikz}\sum_{m=1}^{M}\int_{-\infty}^{\infty} A_0^{(e,m)}(p)e^{-i\pi\lambda z p^2}e^{2i\pi p x}dp \\
&= e^{ikz}\sum_{m=1}^{M}[\int_{-\infty}^{0}\frac{A_m}{\alpha_m}\pi g_e(i\alpha_m)e^{2\pi p\alpha_m}e^{-i\pi\lambda z p^2}e^{(2i\pi p x)}dp \\
&+ \int_0^{\infty}\frac{A_m}{\alpha_m}\pi g_e(i\alpha_m)e^{-2\pi p\alpha_m}e^{-i\pi\lambda z p^2}e^{2i\pi p x}dp] \\
&= \frac{e^{ikz}}{2\sqrt{i\lambda z}}\sum_{m=1}^{M}\frac{A_m\pi}{\alpha_m}g_e(i\alpha_m)[V_x^{(+,m)}(x,z)+V_x^{(-,m)}(x,z)]. \quad (4.60)
\end{aligned}
$$

in cui le espressioni date per i campi V_x^+ e V_x^- sono identiche a quelle date nella 4.17, una volta che siano state opportunamente riscalate dallo spazio tridimensionale a quello bidimensionale. Le due equazioni 4.59-4.60 rappresentano l'obiettivo di questo calcolo. Infatti siamo stati in grado di esprimere una distribuzione di campo piuttosto generica, la 4.27, e la sua propagazione, come una combinazione lineare di un numero finito di campi elementari $V_x^+(x,z)$ and $V_x^-(x,z)$. Considerando le relazioni 4.59-4.60 possiamo riarrangiare la 4.58 come segue

$$
\begin{aligned}
V(x,z) &= \frac{e^{ikz}}{2\sqrt{i\lambda z}}\{\sum_{m=1}^{M}\frac{A_m\pi}{\alpha_m}V_x^{(+,m)}(x,z)[g_e(i\alpha_m)+g_o(i\alpha_m)] \\
&+ \frac{A_m\pi}{\alpha_m}V_x^{(-,m)}(x,z)[g_e(i\alpha_m)-g_o(i\alpha_m)]\}. \quad (4.61)
\end{aligned}
$$

Come utilizzo di tale nuova soluzione del problema parassiale, nella prossima sezione si specificherà la forma assunta dalla funzione $g(x)$.

4.3.1 Una famiglia di fasci super-Lorentziani ortogonali

Delle famiglie di soluzioni ortogonali parassiali oggi note si è dato un breve cenno all'inizio del presente capitolo. Esse nascono come classe di funzioni ortogonali che, nello spazio delle soluzioni, rappresentano una base completa e sono strettamente legate ai problemi di Sturm-Lioville e ai cosiddetti polinomi ortogonali classici. Tuttavia è interessante osservare che si possono trovare altre famiglie di soluzioni ortogonali nel medesimo spazio, che, a dispetto della loro incompletezza, possono risultare utili nelle applicazioni, per esempio come semplici modelli approssimati di complesse distribuzioni di campo per le quali sia ancora non nota la propagazione in forma chiusa. A tal fine, abbiamo appena visto che la propagazione di un campo del tipo 4.27 può essere divisa in una parte pari e una dispari

$$
V_e(x,z) = \frac{e^{ikz}}{2\sqrt{i\lambda z}}\sum_{m=1}^{M}\frac{A_m\pi}{\alpha_m}g_e(i\alpha_m)[V_x^{(+,m)}(x,z)+V_x^{(-,m)}(x,z)] \quad (4.62)
$$

$$V_o(x,z) = \frac{e^{ikz}}{2\sqrt{i\lambda z}} \sum_{m=1}^{M} \frac{A_m \pi}{\alpha_m} g_o(i\alpha_m)[V_x^{(+,m)}(x,z) - V_x^{(-,m)}(x,z)]. \quad (4.63)$$

Incominciamo con il definire la quantità M come *ordine* del fascio. Una volta che sia fissato M e scelti ovviamente gli α_i, $i = 1..M$, ad ogni fascio super-Lorentziano resta associata una famiglia di polinomi ortogonali di ordine $\{0, 1, ...2M-1\}$, dove l'ordine massimo è bloccato a $2M-1$ a causa del lemma di Jordan precentemente introdotto. Una volta sia definito lo spazio dei polinomi $\{1, x, x^2, ...x^{2M-1}\}$ si può costruire una famiglia di campi mutuamente ortogonali mediante il metodo di Gram-Schmidt [72]. Per far questo si parte dalle funzioni

$$g_0(x) = 1 \quad (4.64)$$

$$g_1(x) = x. \quad (4.65)$$

alle quali corrispondono i campi[2]

$$SLB_0(x,0) = g_0(x) \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_i^2)}. \quad (4.66)$$

$$SLB_1(x,0) = g_1(x) \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_i^2)}. \quad (4.67)$$

Se desideriamo che i fasci 4.66-4.67 siano ortogonali deve valere, per il loro prodotto interno

$$\langle SLB_1(x,0), SLB_0(x,0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} SLB_0(x,0) SLB_1^*(x,0) dx = 0. \quad (4.68)$$

dove l'asterisco indica l'operazione di coniugazione. L'integrale 4.68 è nullo poichè si integra una funzione dispari sopra un dominio simmetrico. Se si indica i coefficienti D_0 e D_1 come rispettivamente le norme dei fasci SLB_0 e SLB_1 si ha

$$\begin{aligned} D_0 &= \langle SLB_0(x,0), SLB_0(x,0)\rangle^{1/2} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} SLB_0(x,0) SLB_0^*(x,0) dx\right]^{1/2} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_m^2)^2} dx\right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.69)$$

e la relativa espressione normalizzata SLB_0

$$\begin{aligned} \widetilde{SLB}_0(x,0) &= \frac{g_0(x)}{D_0} \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_i^2)} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_m^2)^2} dx\right]^{-1/2} \cdot \prod_{i=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_i^2)}. \end{aligned} \quad (4.70)$$

[2]Per comodità di scrittura ci si riferirà ad un campo Super Lorentiano con l'acronimo SLB (*Super Lorentzian Beam*)

Analogamente per $SLB_1(x)$ e D_1

$$\begin{aligned} D_1 &= \langle SLB_1(x,0), SLB_1(x,0)\rangle^{1/2} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} SLB_1(x,0)SLB_1^*(x,0)dx\right]^{1/2} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2+\alpha_m^2)^2}dx\right]^{1/2}. \end{aligned} \tag{4.71}$$

e quindi la versione normalizzata di SLB_1 è

$$\begin{aligned} \widetilde{SLB}_1(x,0) &= \frac{SLB_1(x,0)}{D_1} \\ &= [\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{M} \frac{x^2}{(x^2+\alpha_m^2)^2}dx]^{-1/2} \cdot \prod_{i=1}^{M} \frac{x^2}{(x^2+\alpha_i^2)}. \end{aligned} \tag{4.72}$$

Procediamo con i campi di ordine superiore. Per $SLB_2(x,0)$ la $g(x)$ risulta essere

$$g_2(x) = (C_{20} + x^2) \tag{4.73}$$

e deve valere $\langle SLB_2(x,0), SLB_0(x,0)\rangle = 0$ e $\langle SLB_2(x,0), SLB_1(x,0)\rangle = 0$. D_2, come al solito, indica il prodotto $\langle SLB_2|SLB_2\rangle^{-1/2}$. Ancora, per questioni di parità, risulta automaticamente soddisfatta la $\langle SLB_2(x,0), SLB_1(x,0)\rangle = 0$. Mentre per la prima condizione imponiamo

$$\langle SLB_2(x,0), SLB_0(x,0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (C_{20} + x^2) \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2+\alpha_m^2)^2}dx = 0. \tag{4.74}$$

che produce

$$C_{20} = -\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{M} \frac{x^2}{(x^2+\alpha_m^2)^2}dx \left[\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2+\alpha_m^2)^2}dx\right]^{-1}. \tag{4.75}$$

Questo processo sistematico può essere esteso fino al fascio di ordine massimo. Generalizzando possiamo scrivere, per $p > 1$,

$$SLB_{2p}(x,0) = g_{2p}(x) \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2+\alpha_m^2)}. \tag{4.76}$$

dove

$$g_{2p}(x) = x^{2p} + \sum_{k=0}^{p-1} C_{(2p)(2k)} x^{2k}. \tag{4.77}$$

e

$$SLB_{2p+1}(x,0) = g_{2p+1}(x) \prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2+\alpha_m^2)}. \tag{4.78}$$

in cui

$$g_{2p+1}(x) = x^{2p+1} + \sum_{k=0}^{p-1} C_{(2p+1)(2k+1)} x^{2k+1}. \tag{4.79}$$

Mediante questo procedimento abbiamo quindi specificato la forma per alcune funzioni $g(x)$ in modo tale da ottenere, in corrispondenza, altrettanti campi super-Lorentziani ortogonali tra loro. Tutto ciò però è stato ottenuto per $z = 0$. Le famiglie di fasci ortogonali e completi di cui si parlava sopra sono ortogonali non solo sul piano sorgente ma per ogni piano $z \neq 0$. Cosa accade invece per i campi ortogonali del tipo super-Lorentz appena introdotti? La condizione di ortogonalità è mantenuta in propagazione parassiale? La risposta a questa domanda è affermativa ed è indipendente da qualsiasi questione di parità. Una semplice dimostrazione, che fa uso del teorema di Parseval [73]-[74], può essere la seguente. Se indichiamo con $V_1(x,z)$ e $V_2(x,z)$ due generici campi ottici parassiali, possiamo scrivere il loro prodotto scalare come

$$\langle V_2(x,z), V_1(x,z)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} V_1(x,z) V_2^*(x,z) dx. \tag{4.80}$$

Per il teorema di Parseval possiamo però calcolare il prodotto scalare nel dominio di Fourier

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} V_1(x,z) V_2^*(x,z) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} A_1^{(z)}(p)(A_2^{(z)}(p))^* dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} A_1^{(0)}(p) e^{-i\lambda\pi z p^2} (A_2^{(0)}(p))^* e^{i\lambda\pi z p^2} dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} A_1(0) A_2^*(0) dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} V_1(x,0) V_2^*(x,0) dx \\
&= \langle V_2(x,0), V_1(x,0)\rangle. \qquad (4.81)
\end{aligned}$$

dove $A_r^{(z)} = A_r^{(0)} e^{-i\lambda\pi z p^2} e^{ikz}$ è lo spettro di onde piane su z e $A_r^{(0)}$, $r = 1, 2$, è quello su $z = 0$. Ciò che ha giocato un ruolo essenziale nella dimostrazione è il fatto che, per dirla nel linguaggio della teoria dei segnali, la propagazione parassiale non altera la banda dello spettro di un segnale (luminoso, in questo caso), alterandolo soltanto per un termine di fase. Poichè nel calcolo del prodotto scalare un comune sfasamento (prodotto dalla propagazione parassiale) è ininfluente, ecco spiegato il risultato. Ragionando invece da un diverso punto di vista, possiamo dire che il fatto che l'ottica di Fresnel conservi i prodotti scalari significa che essa è associata ad un operatore unitario [14]-[75] che, come ben noto, può essere descritto per mezzo di un'isometria[3]. Chiarito questo punto essenziale, possiamo passare a fare degli

[3]La Meccanica Quantistica presenta una grande quantità di operatori unitari che descrivono le osservabili per il sistema in studio. Come spiegato dal Teorema di Wigner, essi

esempi concreti di campi super-Lorentziani ortogonali. Incominciamo con il fissare $M = 1$. In questo caso la famiglia di fasci super-Lorentziani ortogonali è composta soltanto da due elementi. Se si svolgono i conti come precedentemente riportato, relazioni 4.70-4.71, si ottiene

$$\widetilde{SLB}_0(x,0) = \sqrt{\frac{2\alpha^3}{\pi}}\frac{1}{(x^2+\alpha^2)}. \tag{4.82}$$

$$\widetilde{SLB}_1(x,0) = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\frac{x}{(x^2+\alpha^2)}. \tag{4.83}$$

In figura 4.4 è graficato l'andamento dei campi e delle relative intensità su $z = 0$.
Se invece $M = 2$, esisteranno quattro fasci ortogonali. Effettuanto i conti si ottiene

$$\widetilde{SLB}_0(x,0) = \frac{1}{D_0(x^2+\alpha_1^2)(x^2+\alpha_2^2)}. \tag{4.84}$$

$$\widetilde{SLB}_1(x,0) = \frac{x}{D_1(x^2+\alpha_1^2)(x^2+\alpha_2^2).} \tag{4.85}$$

$$\widetilde{SLB}_2(x,0) = \frac{C_{20}+x^2}{D_2(x^2+\alpha_1^2)(x^2+\alpha_2^2)}. \tag{4.86}$$

$$\widetilde{SLB}_3(x,0) = \frac{C_{31}x+x^3}{D_3(x^2+\alpha_1^2)(x^2+\alpha_2^2)}. \tag{4.87}$$

dove, utilizzando le condizioni $\langle\widetilde{SLB}_i|\widetilde{SLB}_j\rangle = \delta_{ij}$, con $i,j = 0,1,2,3$ e δ_{ij} simbolo di Kronecker, si trovano i corretti valori per i coefficienti C_{20}, C_{31}, D_0, D_1, D_2 e D_3.

$$\begin{aligned}
C_{20} &= -\frac{\alpha_1^2\alpha_2^2}{\alpha_1^2+3\alpha_1\alpha_2+\alpha_2^2} \\
C_{31} &= -\alpha_1\alpha_2 \\
D_0^2 &= \frac{\pi(\alpha_1^2+3\alpha_1\alpha_2+\alpha_2^2)}{2\alpha_1^3\alpha_2^3(\alpha_1+\alpha_2)^3} \\
D_1^2 &= \frac{\pi}{2\alpha_1\alpha_2(\alpha_1+\alpha_2)^3} \\
D_2^2 &= \frac{\pi(\alpha_1^2+6\alpha_1\alpha_2+\alpha_2^2)}{2(\alpha_1+\alpha_2)^3(\alpha_1^2+3\alpha_1\alpha_2+\alpha_2^2)} \\
D_3^2 &= \frac{\pi(\alpha_1^2+6\alpha_1\alpha_2+\alpha_2^2)}{(\alpha_1+\alpha_2)^3}.
\end{aligned} \tag{4.88}$$

In figura 4.5 viene riportato il relativo andamento, sempre per $z = 0$. Per quanto attiene al comportamento in propagazione libera, le figure 4.6

sono associati alle trasformazioni di simmetria mediante isometrie lineari o antilineari e vengono costruiti per mezzo del fondamentale teorema di Stone [75].

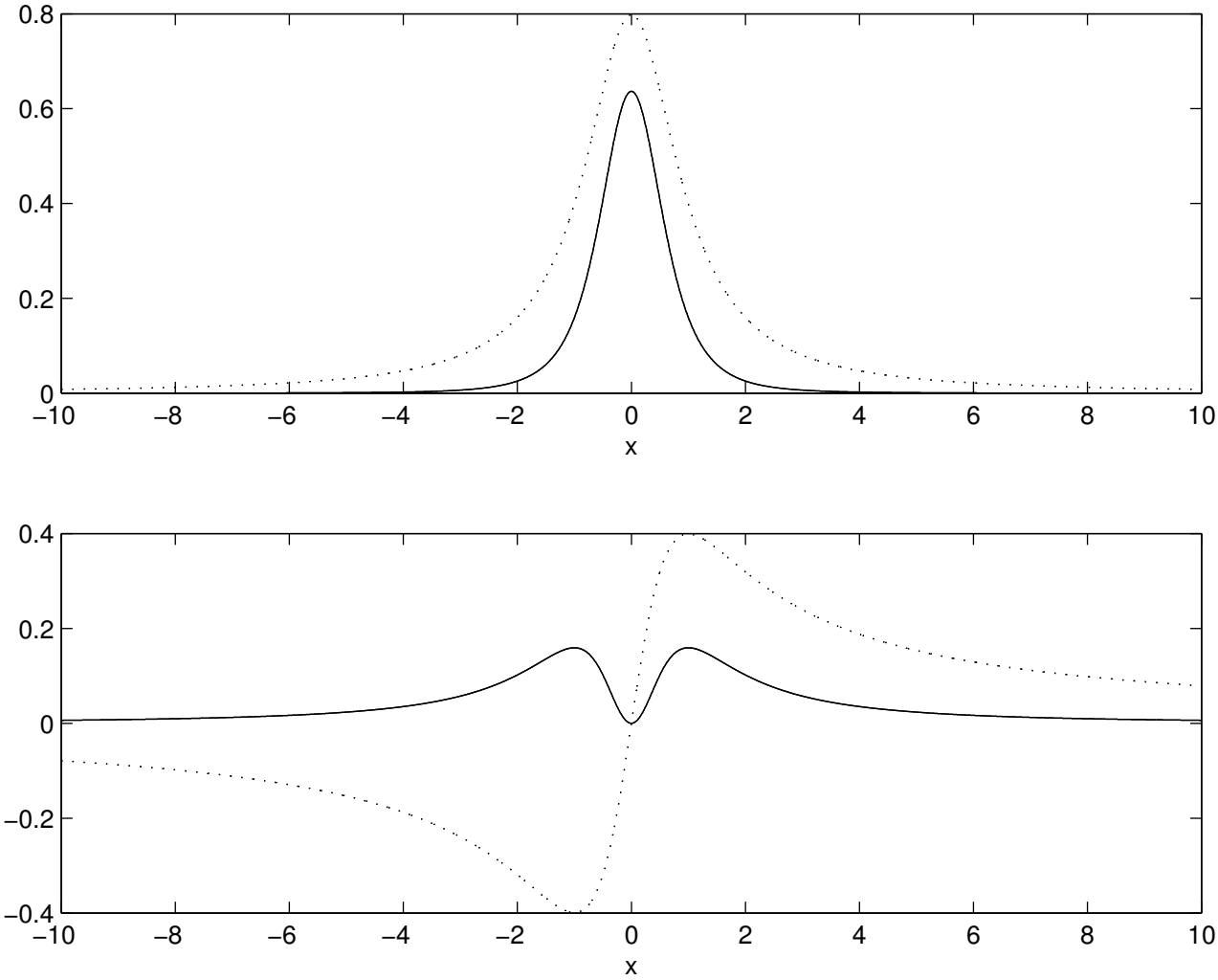

Figura 4.4: Ampiezza del campo (linea continua) e intensità (linea tratteggiata) per il primo (a) e secondo (b) campo super-Lorentziano corrispondenti a $M = 1$. Si è scelto $\alpha = 1$. L'ascissa è in unità adimensionali normalizzata al valore di α.

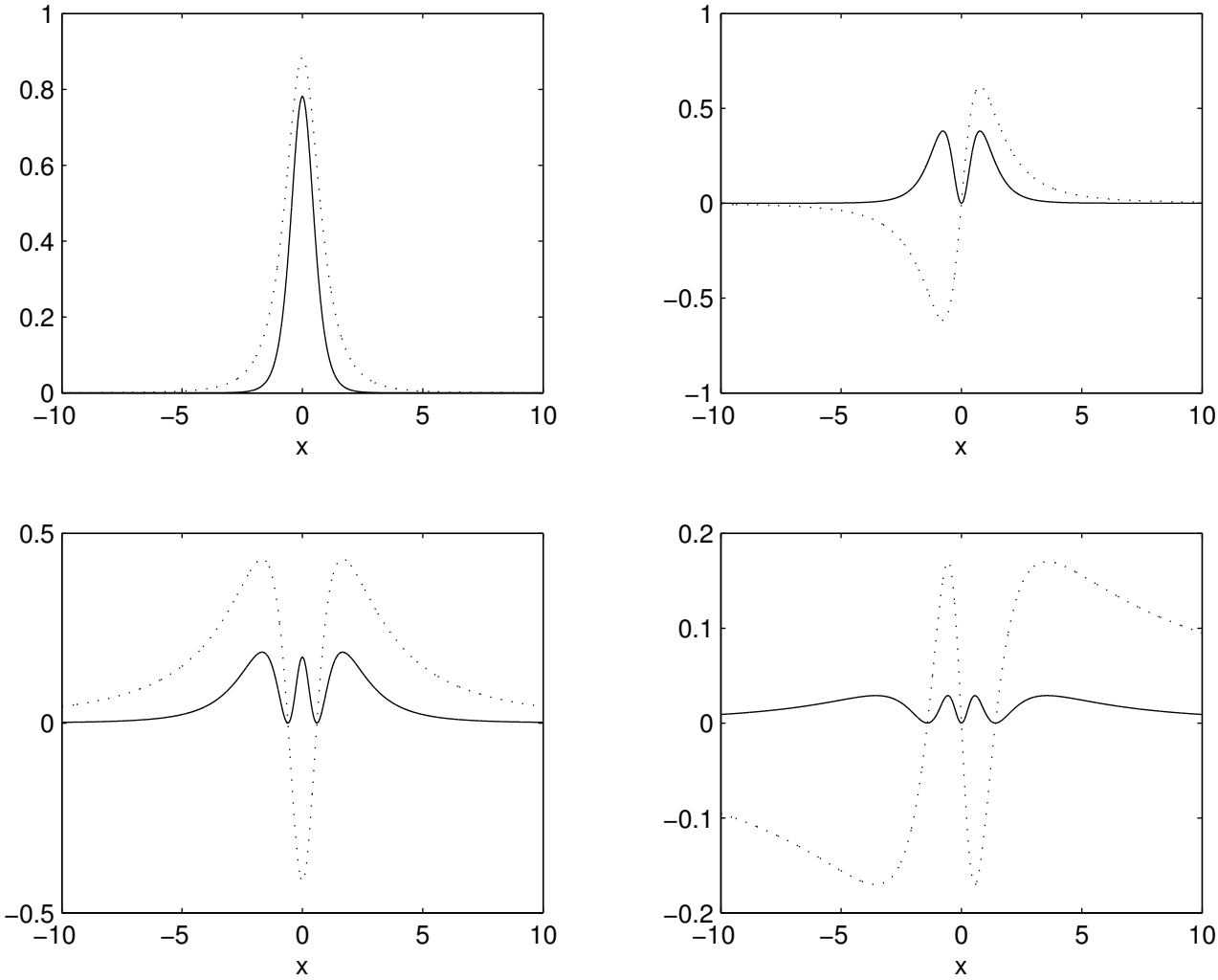

Figura 4.5: La famiglia di quattro campi super-Lorentziani ortogonali ottenuta per $M = 2$. Si riporta l'ampiezza del campo (linea tratteggiata) e l'intensità (linea continua) su $z = 0$. I parametri sono stati fissati come segue: $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 2$. L'ascissa è in unità adimensionali normalizzata al valore di α_1.

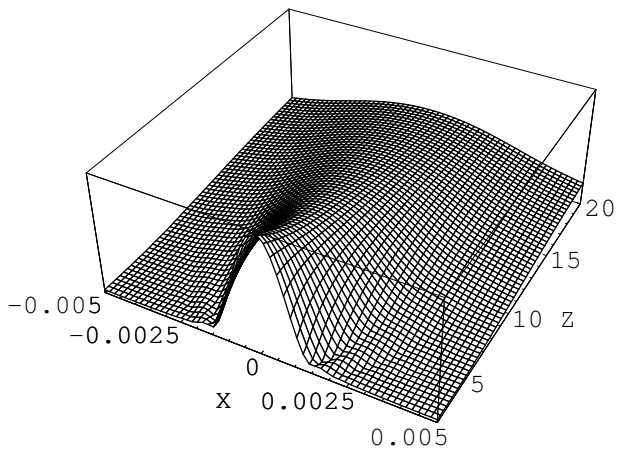

Figura 4.6: Modulo del fascio $SLB_0(x,z)$ graficato per i seguenti valori: $\lambda = 6 \cdot 10^{-7}$ [m], $\alpha_1 = 10^3\lambda$, $\alpha_2 = 2\alpha_1$. le variabili x e z sono espresse in metri. La variabile z è compresa nell'intervallo $[z_{R_1}, z_{R_2}]$ con $z_{R_1} = 3.7m$ e, $z_{R_2} = 15m$.

e 4.7 mostrano l'andamento per i fasci SLB_0 e SLB_2. Per i valori scelti per i due poli, le distanze di Rayleigh sono $z_{R_1} = 2\pi\alpha_1^2/\lambda \sim 3,7$ [m] e $z_{R_2} = 2\pi\alpha_2^2/\lambda \sim 15$ [m]. La cosa interessante è notare, nell'osservare le figure 4.4 e 4.5, delle similitudini tra questi campi ed i corrispettivi, di medesimo ordine, relativi alla famiglia di fasci Hermite-Gauss.
Le differenze sostanziali tra le due famiglie sono essenzialmente due. La prima è nel numero di elementi che compongono l'insieme (finito in un caso ed infinito nell'altro), cosa che dipende dall'ordine M. Esso è infatti determinato, per un fascio super-Lorentziano, dal termine

$$\prod_{m=1}^{M} \frac{1}{(x^2 + \alpha_m^2)}. \tag{4.89}$$

che si comporta come peso in tutti i prodotti scalari, mentre per i fasci di Hermite-Gauss è determinato dal termine Gaussiano (che per i fasci di Hermite-Gauss rappresenta la funzione peso) che, come chiaro, possiede un ordine infinito. Si può però pensare che al crescere dell'ordine M di un fascio di Lorentz, le due classi di fasci tendano sempre più ad assomigliarsi, diventando, da un certo valore di M in poi, praticamente indistinguibili. Possiamo giustificare questa considerazione osservando che la trasformata di Fourier della 4.89 è una convoluzione di M termini positivi, ciascuno dei quali del tipo 4.6, e tende, per il Teorema del Limite Centrale [73], proprio ad una forma Gaussiana quando $M \to \infty$. La seconda, e probabilmente la più importante differenza tra le due famiglie di fasci ottici, riguarda la

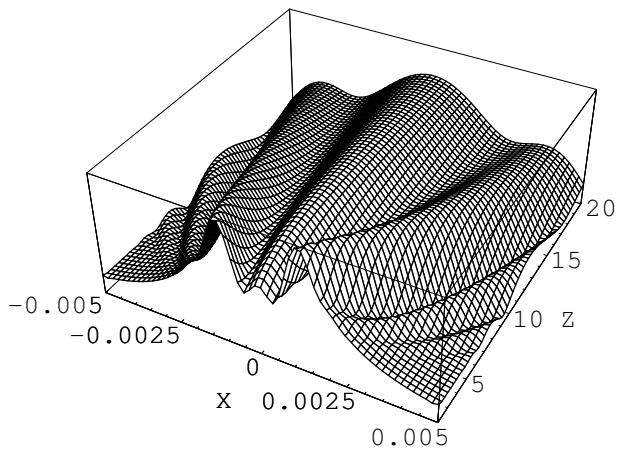

Figura 4.7: Modulo del campo $SLB_2(x, z)$. I valori dei parametri sono fissati come in figura 4.6

loro completezza come basi per descrivere altri campi parassiali. Infatti si è già detto che un qualunque campo parassiale si può sempre esprimere in modo esatto come combinazione lineare di una somma infinita di fasci di Hermite-Gauss, il che rende tale famiglia una base completa, mentre ciò non accade per la famiglia di fasci super-Lorentziani. In ogni caso, a dispetto della loro incompletezza, nella prossima sezione vedremo come la classe di soluzioni parassiali fin qui introdotte possa trovare un fruttuoso impiego nell'approssimare differenti distribuzioni di fasci luminosi.

4.3.2 Applicazioni

In questa sezione vogliamo abbandonare l'ipotesi di poli reali, essendo però sempre interessati a studiare il comportamento di distribuzioni di campo che su di un piano di partenza siano reali. Se quindi ammettiamo che i coefficienti α_i e β_i nella 4.26 siano in generale complessi essi dovranno apparire in una doppia simmetria: rispetto all'asse immaginario e rispetto all'asse reale. In particolare se il campo 4.27 amette un polo α_ξ allora avrà anche i poli $-\alpha_\xi, \alpha_\xi^*$ e $-\alpha_\xi^*$. Tutto quanto fatto nei paragrafi precedenti rimane valido anche se nel calcolo dei residui, per esempio nel caso $k_x > 0$, all'espressione del residuo 4.48 occorre aggiungere il contributo in $-\alpha_n^*$ (e analogamente per il caso $k_x < 0$ va aggiunto il contributo del polo α_n^*). Tenuto presente questo, utilizziamo un fascio super-Lorentziano per descrivere, con una precisione stabilita a priori, la propagazione di un dato fascio Gaussiano. Supponiamo di avere, ad esempio, il seguente fascio in corrispondenza di $z = 0$:

$$V(x, 0) = e^{-x^2/w_0^2}. \tag{4.90}$$

con $w_0 = 100\mu m$. Se si espande $V(x,0)$ in serie di Taylor, volendo accettare un errore di circa 0.5% nella rappresentazione, si può scrivere

$$\begin{aligned} V(x,0) &= \frac{1}{e^{x^2/w_0^2}} \simeq [\sum_{n=0}^{5} \frac{(x/w_0)^{2n}}{n!}]^{-1} \\ &= \frac{1}{1+(x/w_0)^2+\frac{(x/w_0)^4}{2}+\frac{(x/w_0)^6}{6}+\frac{(x/w_0)^8}{24}+\frac{(x/w_0)^{10}}{120}}. \end{aligned} \tag{4.91}$$

ovvero

$$V(x,0) \simeq \prod_{i=1}^{5} \frac{c}{(x^2+\alpha_i^2)}. \tag{4.92}$$

dove i valori calcolati degli α_i^2 sono $\alpha_1^2 = w_0^2(0.2398 + 3.1283\imath)$, $\alpha_2^2 = w_0^2(0.2398 - 3.1283\imath)$, $\alpha_3^2 = w_0^2(-1.6495 + 1.6939\imath)$, $\alpha_4^2 = w_0^2(-1.6495 - 1.6939\imath)$, $\alpha_5^2 = -2.1806w_0^2$ e $c = 120w_0^{10}$. Per confronto tra la 4.92 e la 4.27 si vede che risulta $g(x) = 1$. In figura 4.8 si riportano i comportamenti della Gaussiana approssimata, accanto all'errore commesso, rispetto alla Gaussiana originale, mentre la figura 4.9 mostra la propagazione del campo approssimante: nonostante la semplicità del modello è evidente che le proprietà del fascio Gaussiano vengono riprodotte in modo piuttosto soddisfacente.
Volendo fare un esempio 3D, confrontiamo il comportamento di un fascio di Hermite-Gauss di ordine $(2,0)$ e il relativo campo super-Lorentziano approssimante (scelto di ordine $M = 5$). I risultati sono graficati in figura 4.10, che mostra i valori dei moduli dei campi a differenti piani (x,y,z). Possiamo concludere dicendo, quindi, che una forma di campo del tipo 4.61 può essere utilizzata per descrivere in modo approssimato, ma con un errore determinabile a priori, il comportamento parassiale di varie e differenti distribuzioni di campo note su di un piano di partenza.

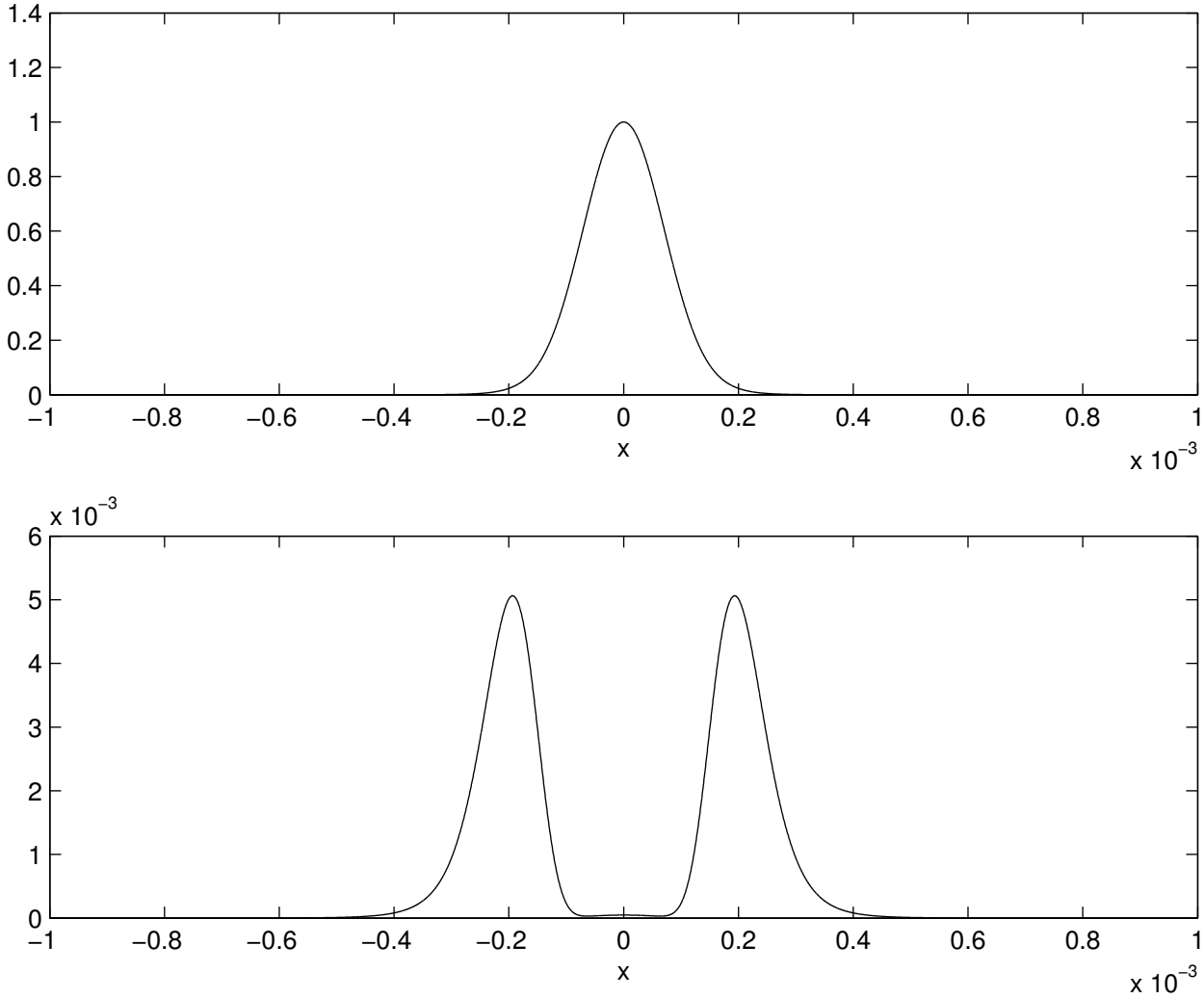

Figura 4.8: Il fascio Gaussiano fondamentale e^{-x^2/w_0^2}, rappresentato mediante un fascio super-Lorentziano come indicato nella formula 4.92 (a) e errore relativo (b). I grafici sono effettuati su $z = 0$. $w_0 = 100\mu m$. L'ascissa è in metri.

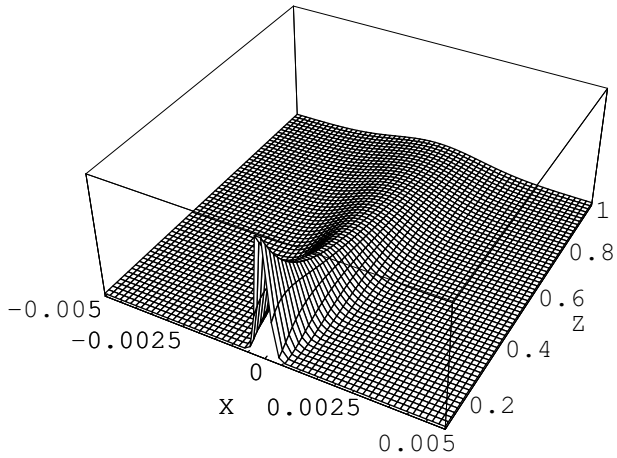

Figura 4.9: Propagazione di un fascio super-Lorentziano di ordine $M = 5$, descrivente il fascio Gaussiano e^{-x^2/w_0^2}, con $w_0 = 100\mu m$. Le simulazioni sono fatte per $\lambda = 0.6328\mu m$. I valori di x e z sono in metri.

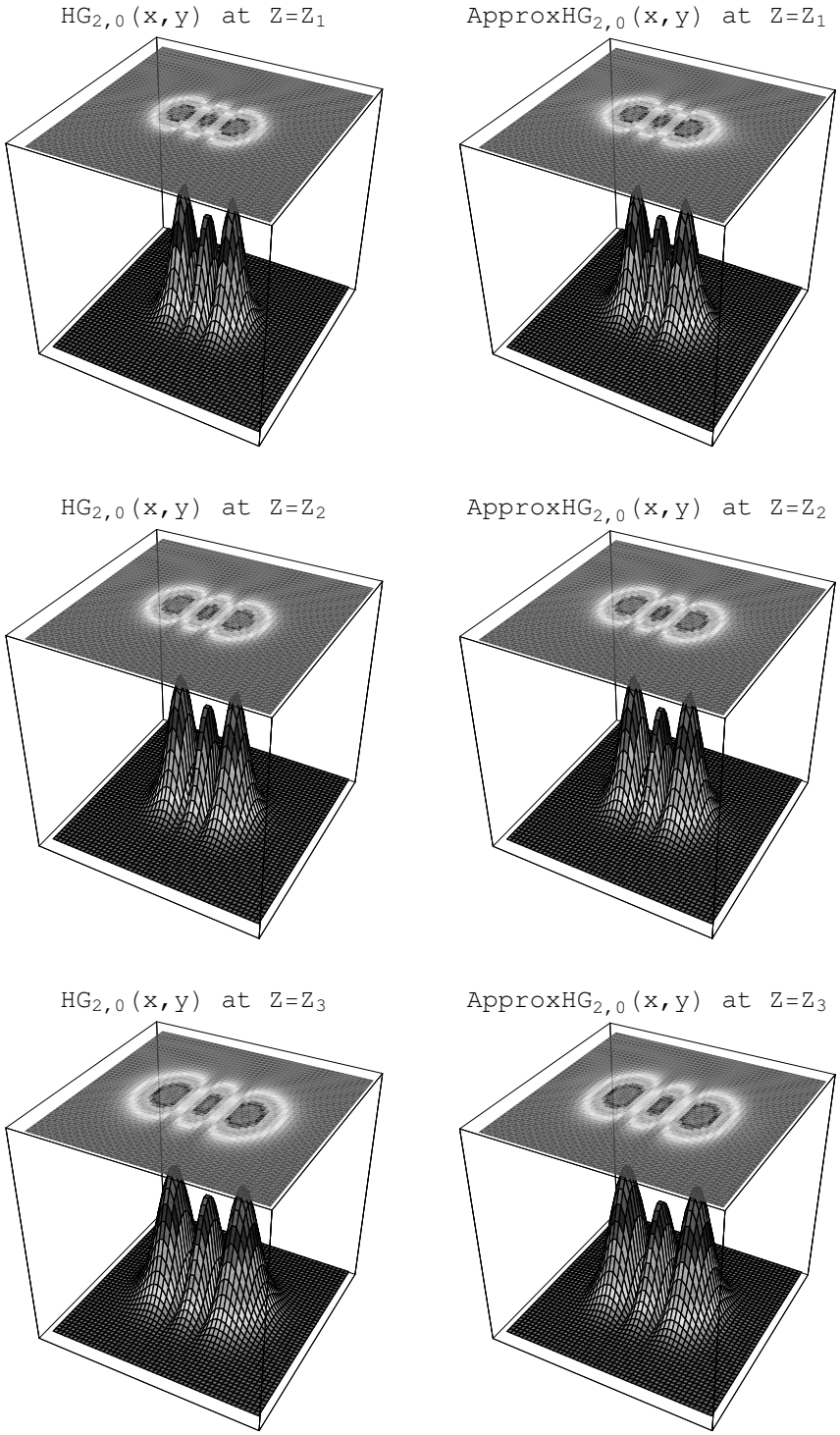

Figura 4.10: Andamento del modulo, in unità arbitrarie, del fascio di Hermite-Gauss HG_{20} (lato sinistro) e la sua descrizione approssimata mediante un fascio super-Lorentziano di ordine $M = 5$ (lato destro). I grafici sono stati realizzati per $z_1 = 0$, $z_2 = 0.5\, z_R$, $z_3 = z_R$, dove z_R è la distanza di Rayleigh del fascio di Hermite-Gauss. I parametri sono stati scelti come segue: $\lambda = 0.6328\mu m$, $w_0 = 100\mu m$ e M=5. Le coordinate spaziali (x, y) sono normalizzate al valore w_0 e vanno da $[-5, 5] \times [-5, 5]$.

Capitolo 5

Ottica parassiale vettoriale

Fin qui ci siamo concentrati esclusivamente su soluzioni di campo parassiali scalari. Mediante esse è possibile costruire delle soluzioni per il corrispettivo problema vettoriale dotate di stati di polarizzazione inusuali, ovvero che non siano uniformi su tutti i punti del piano trasverso alla direzione media di propagazione. Nella prossima sezione si intende mostrare un possibile procedimento piuttosto generale per derivare questi stati di polarizzazione non convenzionali, partendo da soluzioni note del problema scalare.

5.1 Stati di polarizzazione a simmetria ellittica

Vogliamo dimostrare come, utilizzando semplici argomenti, sia possibile trovare delle soluzioni parassiali vettoriali dotate di stati di polarizzazione non convenzionali, combinando opportunamente soluzioni del più semplice problema scalare. Partendo dalle equazioni di Maxwell nel vuoto, in assenza di sorgenti, si arriva alla seguente coppia di equazioni per il campo $\mathbf{E}$

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} &= k^2 \mathbf{E} \\ \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0. \end{aligned} \tag{5.1}$$

Introducendo la parte "lentamente variabile" di $\mathbf{E}$, chiamiamola $\mathbf{F}$, data da

$$\mathbf{E} = \mathbf{F} e^{(ikz)} \tag{5.2}$$

e facendo uso dell'approssimazione parassiale, abbiamo già detto (si veda nella sezione 1.3) che $\mathbf{F}$ è governata dalle equazioni [37]

$$\nabla_\perp^2 \mathbf{F}_\perp + 2ik\partial_z \mathbf{F}_\perp = 0. \tag{5.3}$$

$$\nabla_\perp \cdot \mathbf{F}_\perp + ikF_z = 0. \tag{5.4}$$

in cui esso è stato decomposto in una parte trasversa ed una longitudinale ovvero $\mathbf{F} = \mathbf{F}_\perp + F_z\hat{z}$. Se adesso decomponiamo $\mathbf{F}_\perp$ in coordinate Cartesiane, cioè se poniamo $\mathbf{F}_\perp = F_x\hat{x} + F_y\hat{y}$, si derivano una coppia di equazioni parassiali scalari, una per ogni singola componente

$$\nabla_\perp^2 F_x + 2ik\partial_z F_x = 0. \tag{5.5}$$

$$\nabla_\perp^2 F_y + 2ik\partial_z F_y = 0. \tag{5.6}$$

Le equazioni (5.5)-(5.6) possono essere riscritte come $PF_x = 0$ $PF_y = 0$, dopo aver introdotto l'operatore lineare differenziale $P = \partial_x^2 + \partial_y^2 + 2ik\partial_z$. Poichè l'operatore P commuta con gli operatori infinitesimi di spostamento ∂_x, ∂_y e ∂_z [39], è possibile ottenere nuove soluzioni, da soluzioni note, mediante arbitraria differenziazione.
Come caso particolare, supponiamo di conoscere una soluzione del problema parassiale scalare che abbia forma del tipo $f(r,z)$, con $r = \sqrt{x^2+y^2}$. Partendo dalle soluzioni $F_x = f(r,z)$ e $F_y = f(r,z)$, possiamo costruire anche la seguente coppia di soluzioni

$$\begin{aligned} \tilde{F}_x &= A[\partial_x f(r,z)\cos\alpha - \partial_y f(r,z)\sin\alpha] \\ \tilde{F}_y &= B[\partial_y f(r,z)\cos\alpha + \partial_x f(r,z)\sin\alpha]. \end{aligned} \tag{5.7}$$

in cui A e B sono due costanti arbitrarie e α è un angolo costante. Esse sono soluzioni del problema scalare poichè sono state ottenute come combinazione lineare di soluzioni note. Il campo $\mathbf{F}_\perp$ associato alle 5.7 potrà sempre scriversi nella forma

$$\mathbf{F}_\perp = A\, g(r,z)\cos(\theta+\alpha)\hat{x} + B\, g(r,z)\sin(\theta+\alpha)\hat{y}. \tag{5.8}$$

dove r e θ sono, rispettivamente, la coordinata radiale e angolare di un sistema di coordinate circolare e $g(r,z) = \partial_r f(r,z)$. E' interessante trovare la forma delle linee di campo per un tale tipo di soluzione. Esse sono definite dalla relazione

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\tilde{F}_y}{\tilde{F}_x} = \frac{B\sin(\theta+\alpha)}{A\cos(\theta+\alpha)}. \tag{5.9}$$

che diviene, in coordinate polari,

$$\frac{\sin\theta dr + r\cos\theta d\theta}{\cos\theta dr - r\sin\theta d\theta} = a\frac{\sin\theta\cos\alpha + \cos\theta\sin\alpha}{\cos\theta\cos\alpha - \sin\theta\sin\alpha}. \tag{5.10}$$

in cui abbiamo definito $a = B/A$. La (5.10) può essere trasformata nella relazione seguente

$$\frac{dr}{r} = d\theta\frac{[-(\cos^2\theta + a\sin^2\theta)\cos\alpha + \sin 2\theta\sin\alpha(1-a)/2]}{[\sin 2\theta\cos\alpha(1-a)/2 - \sin\alpha(\sin^2\theta + a\cos^2\theta)]}. \tag{5.11}$$

Notiamo che quando $a = 1$ questa equazione diventa

$$\frac{dr}{r} = d\theta \frac{\cos\alpha}{\sin\alpha}. \tag{5.12}$$

e la curva soluzione ha forma di una spirale logaritmica (circolare) introdotta di recente da Gori [76]. Risolvere la (5.10) è più complesso del caso circolare ($a = 1$) a causa della presenza del coefficiente a che rompe la simmetria polare. Possiamo però studiare alcuni casi limite interessanti. In particolare supponiamo che sia $\alpha = 0$. La (5.10) diviene

$$\frac{dr}{r} = d\theta \frac{\cos^2\theta + a\sin^2\theta}{(a-1)\sin\theta\cos\theta}. \tag{5.13}$$

Questa equazione può essere risolta se la riscriviamo nella forma seguente

$$\frac{dr}{r} = d\theta \frac{\cos\theta}{(a-1)\sin\theta} + \frac{a\sin\theta}{(a-1)\cos\theta}. \tag{5.14}$$

Per la soluzione abbiamo

$$r(\theta) = R[\frac{\sin\theta}{(\cos\theta)^a}]^{1/(a-1)}. \tag{5.15}$$

dove R è una costante di integrazione. In coordinate Cartesiane essa si può scrivere come

$$y = Kx^a. \tag{5.16}$$

con K valore costante. L'equazione 5.15 descrive delle linee aperte, che tendono a diventare della semirette uscenti dall'origine degli assi quando $a \to 1$ (polarizzazione radiale circolare, che quindi è un caso particolare della 5.15) e quindi possiamo vederla come la polarizzazione di tipo radiale (ellittica) generata da una combinazione di campi non perfettamente bilanciati in ampiezza.
L'altra situazione interessante da analizzare è per $\alpha = \pi/2$. In questo caso l'equazione 5.11 diventa

$$\frac{dr}{r} = d\theta(a-1)\frac{\sin\theta\cos\theta}{(1+(a-1)\cos^2\theta}. \tag{5.17}$$

e dà

$$r(\theta) = R\frac{1}{(1+(a-1)\cos^2\theta)^{1/2}}. \tag{5.18}$$

La 5.18 è l'equazione polare di un ellisse con asse maggiore (se supponiamo $a > 1$) parallelo all'asse delle y. Quando $a = 1$ essa degenera in un cerchio, ovvero ritroviamo ancora una volta il caso a simmetria circolare. Per analogia possiamo dire che questo stato di polarizzazione è l'analogo della polarizzazione azimutale circolare, ma per una geometria ellittica. Nel caso

intermedio la soluzione dell'equazione è meno semplice. Le linee di campo risultano essere aperte e a forma di spirale, ancora una volta in analogia al caso circolare (si veda relazione 5.12). Una differenza interessante rispetto ai casi a simmetria circolare emerge andando ad osservare l'andamento della intensità prodotta su di un piano generico. Per far questo riscriviamo il campo 5.8 nella forma

$$\mathbf{F}_\perp = Cg(r,z)[\sinh\xi\cos(\theta+\alpha)\hat{x} + \cosh\xi\sin(\theta+\alpha)\hat{y}]. \tag{5.19}$$

definendo C e ξ come segue

$$C^2 = B^2 - A^2. \tag{5.20}$$

$$\cosh\xi = \frac{B}{C}. \tag{5.21}$$

Per l'intensità abbiamo l'espressione

$$I_\perp(r,\theta,z) \propto |\mathbf{E}_\perp|^2 = C^2|f(r,z)|^2[\cosh^2\xi - \cos^2(\theta+\alpha)]. \tag{5.22}$$

Dalla 5.22 si nota che il profilo di intensità dipende dal parametro α. Ma tale parametro è proprio il fattore che controlla lo stato di polarizzazione su ogni piano. Dunque acquisendo un profilo di intensità su di un piano (si ricordi che gli stati di polarizzazione qui introdotti si conservano in propagazione libera) è possibile risalire allo stato di polarizzazione non uniforme del fascio luminoso. Questo avviene in contrasto ai casi a polarizzazione circolare (radiale, azimutale, a spirale) in cui diversi stati di polarizzazione conducono al medesimo profilo di intensità, ovvero c'è una sorta di degenerazione in polarizzazione.
Come esempio di quanto fin qui scritto, nelle figure 5.1, 5.2 e 5.3 si riporta l'andamento sul piano $z = 0$ delle linee di campo per diversi valori dell'angolo α, nel caso in cui $f(r,z) = J_0(r,z)$ con $J_0(r,z)$ fascio di Bessel di ordine zero.
L'analisi svolta conferma quanto avevamo detto nella fase introduttiva di questo lavoro. Infatti si era scritto che lo studio dell'ottica parassiale scalare era importante sia perchè essa rappresenta un modello di ordine zero del campo su cui far poggiare un procedimento di raffinamento successivo, sia perchè si potevano costruire, a partire da soluzioni note scalari, delle soluzioni vettoriali dotate di polarizzazioni speciali, come quelle appena introdotte.

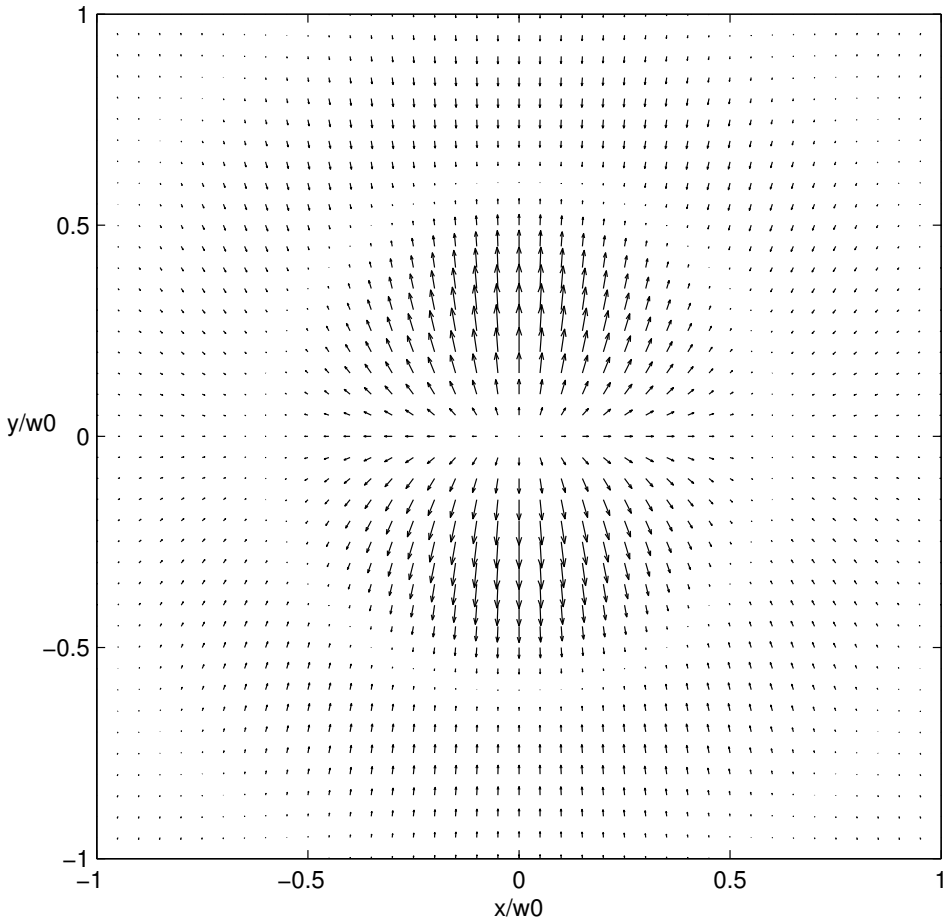

Figura 5.1: Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso radiale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = 0$, $w_0 = 100\mu m$.

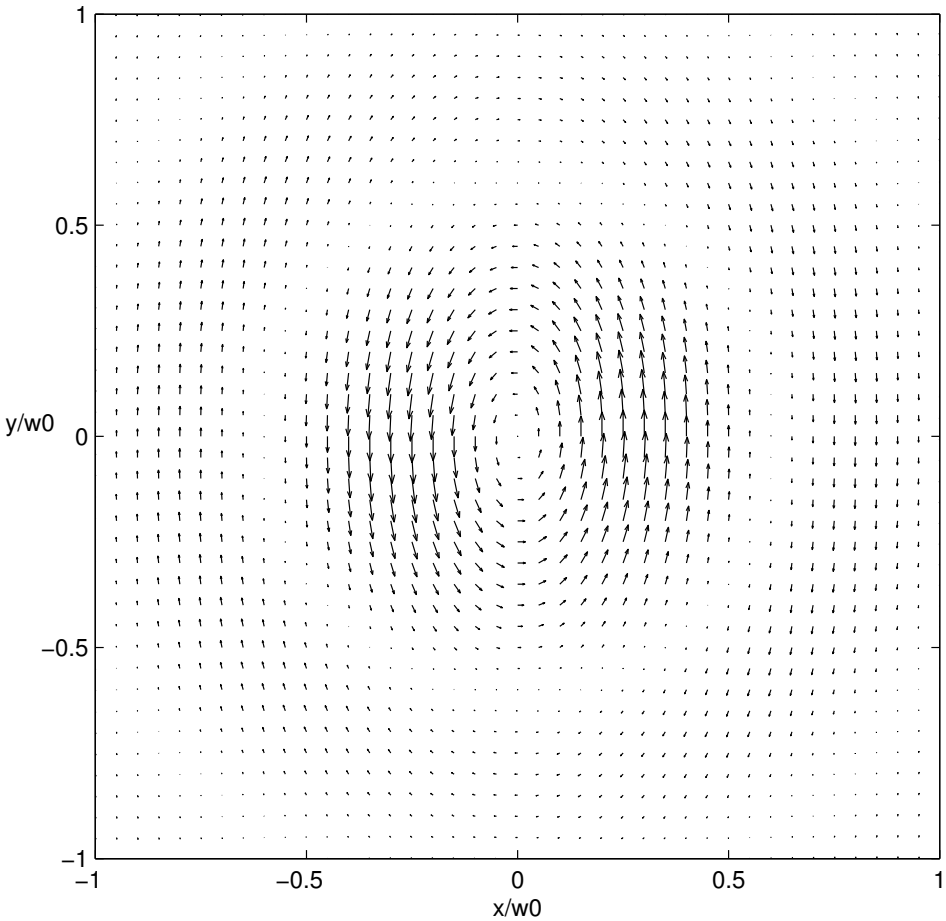

Figura 5.2: Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso azimutale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = \pi/2$, $w_0 = 100\mu m$.

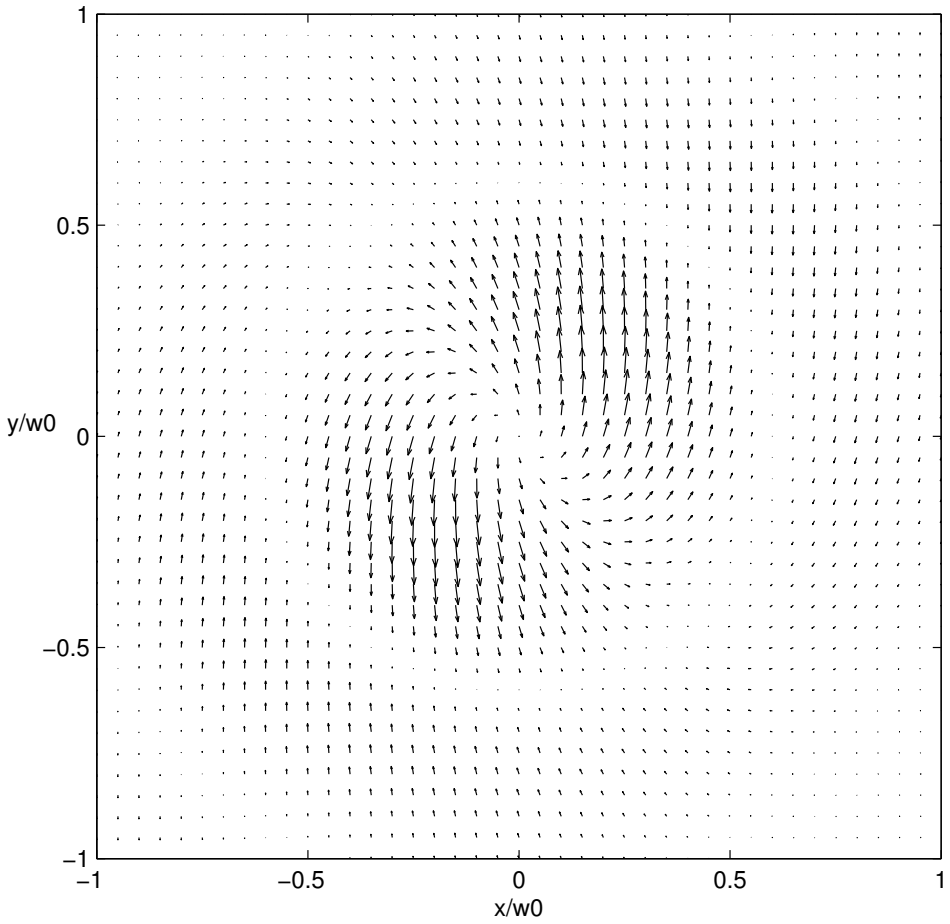

Figura 5.3: Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso a spirale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = 0.8$, $w_0 = 100\mu m$.

Capitolo 6

Micro-spettroscopie Raman e SERS

Nelle precedenti sezioni si è affrontato principalmente il problema della propagazione di campi scalari in approssimazione parassiale mettendo in evidenza l'esistenza di nuove possibili soluzioni e mostrando alcuni ambiti in cui esse potevano trovare applicazione; tale analisi ha anche implicato un approfondimento sistematico delle proprietà di simmetria esistenti in ottica parassiale che ha giovato dell'unione della teoria dei gruppi e del formalismo Lagrangiano per i campi. Si è anche avuto modo di mostrare un'estensione di quanto fatto al caso vettoriale. Tutto ciò ha costituito una parte importante del lavoro complessivamente svolto da chi scrive.
Nell'ultima fase del periodo di dottorato si è però potuto anche partecipare ad un'attività di tipo sperimentale, presso il laboratorio di micro-spettroscopia Raman dell'Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati (ISMN) del Consiglio Nazionale delle Ricerche, in modo da poter creare i presupposti per l'utilizzo di nuovi tipi di campi vettoriali (nuovi sia come profilo di campo che come polarizzazione) nello studio di materiali semiconduttori nanostrutturati. Infatti l'uso di campi dotati di stati di polarizzazione non convenzionale potrebbe produrre effetti benefici sul segnale diffuso da un campione, andando ad eccitare modi normalmente proibiti per altre polarizzazioni, e quindi aumentare di conseguenza la sensibilità di misura; d'altro canto un utilizzo di un fascio non diffrangente come sorgente di eccitazione, a causa della sua profondità di fuoco infinita, potrebbe ridurre di molto i problemi di messa a fuoco sul campione.[1] Nella attività sperimentale preliminare svolta, ci si è concentrati sulla rivelazione del segnale Raman prodotto da molecole biologiche adsorbite sulla superficie di materiali semiconduttori, in particolare di *quantum dots*. Si tratta di un'attività di ricerca piuttosto avanzata

[1] Come già detto, la generazione di un campo non diffrangente in laboratorio non è possibile, per cui occorre emularne il comportamento mediante il corrispettivo campo pseudo non-diffrangente.

che appartiene a quel crescente settore della fisica che va sotto il nome di *nanoscienza*. In questo capitolo, dopo aver rivisto le basi teoriche della spettroscopia Raman, descritto l'apparato di misura utilizzato ed introdotto la spettroscopia SERS, si presenterà lo stato dei lavori, i risultati fin qui ottenuti e i possibili futuri sviluppi.

6.1 Interazione radiazione-materia

Per interazione radiazione-materia si intende quell'insieme di fenomeni che hanno luogo ogni qual volta un campo elettromagnetico investa un sistema inducendo in questo delle mutazioni che siano poi in qualche modo osservabili. Gli effetti prodotti da tale interazione possono risolversi in cambiamenti nelle caratteristiche elettriche, termiche o meccaniche del materiale costituente il corpo oppure possono anche andare a modificare lo stato del campo elettromagnetico nello spazio circostante. Si parla per l'appunto di interazione poichè ciascuno dei due attori del fenomeno, il campo ed il sistema in studio, possono risultare modificati dall'interazione stessa. In realtà converrebbe distinguere tra fenomeni classici di interazione radiazione-materia e quelli non classici, i primi essendo descrivibili trascurando la natura quantistica sia del materiale che del campo[2] i secondi richiedendo invece almeno la quantizzazione della materia (in una trattazione semi-classica) oppure di entrambi (trattazione quantistica pura in cui campo e corpo vengono visti come un unico sistema quantistico). L'effetto Raman è appunto uno dei modi non classici in cui radiazione e materia possono interagire tra loro. Rivediamo brevemente in cosa consiste.

6.1.1 Effetto Raman

Se un campo elettromagnetico investe una molecola l'effetto principale che ne risulta è una modifica della distribuzione della nube elettronica, cosa che viene usualmente quantificata per mezzo della grandezza

$$\mathbf{m} = \alpha \mathbf{E}. \tag{6.1}$$

dove $\mathbf{m}$, detto momento di dipolo elettrico, ed $\mathbf{E}$ sono grandezze vettoriali[3] mentre la polarizzabilità α (che misura la capacità del materiale a produrre momenti di dipolo più o meno intensi, a parità di campo incidente) è in genere un tensore. Per introdurre in modo semplice lo *scattering* Raman supponiamo ora che la molecola sia di tipo biatomico e che, ad una data temperatura T, vibri muovendosi di moto armonico secondo la legge

$$q(t) = q^0 \cos(2\pi\nu_v t). \tag{6.2}$$

[2]Si tratta, per esempio del comportamento del campo sulle superfici di separazione tra due materiali differenti, oppure dei fenomeni di diffrazione già ampiamente descritti.

[3]In questo esempio supporremo il campo elettrico essere reale

dove ν_v è la frequenza di vibrazione propria della molecola e $q(t)$ è la variabile dinamica che descrive il sistema. Per il campo elettrico incidente facciamo l'ipotesi che sia monocromatico e polarizzato lungo x

$$E_x = E_x^0 \cos(2\pi\nu_0 t). \tag{6.3}$$

Ad opera del campo elettrico, la polarizzabilità, che in queste ipotesi si riduce ad uno scalare, può variare essendo una funzione della variabile $q(t)$. Infatti per essa si può utilizzare uno sviluppo in serie di Taylor, che risulta

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha^0 + \left(\frac{d\alpha}{dq}\right)_0 q^0 + \dots \\ &= \alpha^0 + \left(\frac{d\alpha}{dq}\right)_0 q^0 \cos(2\pi\nu_v t) + \dots \end{aligned} \tag{6.4}$$

dove nella 6.4 i termini superiori dello sviluppo sono stati trascurati. Tornando alla 6.1 otteniamo

$$\begin{aligned} m &= \alpha^0 E_x^0 \cos(2\pi\nu_0 t) + E_x^0 \left(\frac{d\alpha}{dq}\right)_0 q_v^0 \cos(2\pi\nu_0 t)\cos(2\pi\nu_v t) \\ &= \alpha^0 E_x^0 \cos(2\pi\nu_0 t) + E_x^0 \left(\frac{d\alpha}{dq}\right)_0 q_v^0 \left\{\cos[2\pi(\nu_0 - \nu_v)t]\right. \\ &+ \left.\cos\left[2\pi(\nu_0 + \nu_v)t\right]\right\} \end{aligned} \tag{6.5}$$

Dalla 6.5 risulta che il mezzo risponde alla sollecitazione esterna producendo sia un campo di ampiezza proporzionale all'ampiezza del campo incidente e con lunghezza d'onda invariata (diffusione Rayleigh) che due segnali di frequenza differente, uno centrato a $\nu_0 + \nu_v$ (riga anti-Stokes) e l'altro a $\nu_0 - \nu_v$ (riga Stokes) di ampiezza proporzionale alla derivata della polarizzabilità rispetto alla variabile q. L'analisi Raman è proprio lo studio della diffusione anelastica, sia nella sua componente Stokes che anti-Stokes, in modo da ottenere informazioni sul materiale coinvolto.
Infatti la risposta del materiale fornisce informazioni sulla sua composizione chimica e strutturale, essendo direttamente legata ai modi rotovibrazionali caratteristici delle molecole costituenti il campione. Si tratta comunque di processi con efficienze molto basse. Tipicamente il rapporto tra intensità di riga Rayleigh e intensità del campo incidente è circa pari a 10^{-3}, mentre quello tra riga Raman[4] e campo incidente è di circa 10^{-6}. Il modello semplificato introdotto, sebbene abbia permesso di spiegare in modo semplice l'effetto che si osserva, non mette però in risalto un aspetto importante, ovvero che in genere l'ampiezza dei segnali Stokes e anti-Stokes non è affatto uguale, essendo la parte anti-Stokes sempre di entità minore rispetto allo Stokes. Per comprendere questa differenza supponiamo di avere una molecola con un sistema di energia a due livelli (che supporremo vibrazionali), come schematicamente riportato in figura 6.1. Nella figura vengono riportati dei

[4] Quando ci si riferisce a diffusione Raman *tout court* si sottoindende solo la componente Stokes.

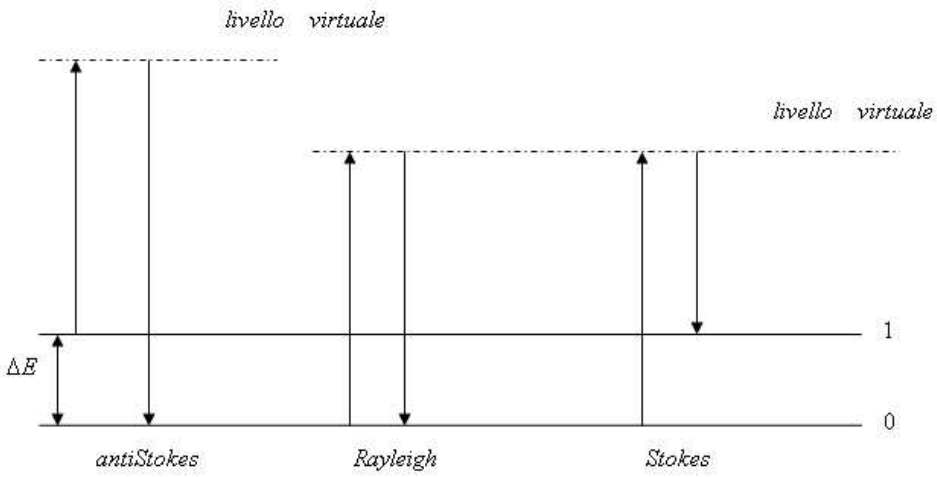

Figura 6.1: Un diagramma di livelli di energia semplificato che spiega l'origine delle righe Stokes e anti-Stokes in una molecola.

livelli virtuali di energia che vengono, appunto *virtualmente*, popolati dalla molecola nel suo insieme in conseguenza dell'azione polarizzatrice del campo elettromagnetico incidente. Si tratta di livelli virtuali poichè la condizione di polarizzazione in realtà non implica alcun cambiamento nella configurazione elettronica della molecola e quindi il valore di tali livelli non è associato ad alcun valore preciso di energia. Una volta che la molecola abbia assorbito il fotone incidente, di energia $h\nu_0$, ed in conseguenza di ciò si sia polarizzata e quindi abbia popolato un livello virtuale, tende a rilassare come indicato in figura 6.1. Il processo di rilassamento più probabile è quello nel quale non si ha cambiamento nel numero quantico vibrazionale e che porta alla riemissione di un fotone ad energia $h\nu_0$ (contributo Rayleigh). Possono però anche verificarsi processi di rilassamento che producono una variazione nel numero quantico vibrazionale, il che porta alla diffusione anelastica Raman. Come si evince dalla figura, l'intensità dello *scattering* Raman dipende dalla popolazione dello stato energetico iniziale. Poichè nel caso Stokes tale livello coincide con il livello più basso (il livello 0 nel diagramma), ci si aspetta che l'intensità del segnale luminoso associato sia maggiore rispetto al caso anti-Stokes, nel quale invece il livello iniziale è il primo stato vibrazionale eccitato (livello 1 della figura). E' noto che il rapporto tra queste due popolazioni è regolato dalla legge di Boltzmann

$$\frac{n_1}{n_0} \propto e^{\frac{-\Delta E}{KT}}. \tag{6.6}$$

dove n_0 e n_1 indicano le popolazioni del livello 0 e 1 rispettivamente, ΔE la differenza di energia tra i due livelli, K la costante di Boltzmann e T la temperatura assoluta. Per avere un'idea dell'ordine di grandezza del rapporto 6.6 si prenda il caso della *clorina* allo stato gassoso, una molecola per

la quale risulta $\Delta E = 505cm^{-1}$ ovvero $\Delta E = 1.00310^{-20}J$. La 6.6 vale quindi, a temperatura ambiente, circa 0.087 [5]. Tuttavia questo valore fornisce una stima per difetto di tale rapporto, poichè non tiene in conto che l'efficienza della diffusione Raman va come la quarta potenza della frequenza del campo (si veda la formula della potenza media irraggiata da un dipolo oscillante [86],[87],[88]) e quindi, sebbene ridotta dal fattore di Boltzmann, la riga anti-Stokes ha più efficienza di diffusione, rispetto al segnale Stokes, in virtù del rapporto

$$\frac{(\nu_0 + \nu_v)^4}{(\nu_0 - \nu_v)^4}. \tag{6.7}$$

da tenere in conto. Nel complesso, il rapporto tra le due intensità si può scrivere come segue:

$$\frac{I_{anti-Stokes}}{I_{Stokes}} = \frac{(\nu_0 + \nu_v)^4}{(\nu_0 - \nu_v)^4}\, e^{\frac{-h\nu_v}{KT}}. \tag{6.8}$$

Tornando all'esempio della clorina gassosa, se eccitata con una radiazione di frequenza $\nu_0 = 19436cm^{-1}$ (laser Ar^+ a $514nm$) tale rapporto sale a 0.107. Una cosa importante da sottolineare è che lo *scattering* Raman può essere prodotto da una sorgente di lunghezza d'onda qualunque (proprio perchè la radiazione va a modificare la polarizzazione della molecola, portandola ad uno stato virtuale di eccitazione); in conseguenza di questo, gli spettri osservati riportano l'andamento dell'intensità della radiazione Raman in funzione dello spostamento (*shift*) in frequenza rispetto alla energia di eccitazione. Si parla quindi, più che di frequenza di una riga, del suo *Raman shift*. In genere la presenza di una riga Raman non dipende dal tipo di sorgente utilizzata per eccitare il campione in studio, ma ciò che può cambiare è il rapporto tra le intensità di riga, in un medesimo spettro. Questo accade perchè l'efficienza di diffusione varia come $(\nu_0 - \nu_v)^4$ e quindi di conseguenza varia l'intensità relativa tra le varie bande presenti. E' importante poi ricordare che non tutti i modi vibrazionali sono Raman-attivi. Infatti, dalla 6.5 vediamo che solo quei modi che hanno un gradiente $\partial_q \alpha \neq 0$ si associano ad un segnale Raman.

6.2 Apparato sperimentale

Il problema centrale nel realizzare una misura di spettroscopia Raman è rappresentato dal bassissimo livello dei segnali trattati. Oltre alla diffusione

[5] In spettroscopia è d'uso indicare le frequenza delle vibrazioni molecolari in termini del numero d'onda. In effetti, se le si dovesse riportare in Hertz, esse assumerebbero valori elevati, dell'ordine di $10^{12} - 10^{14}$Hz. Per questo motivo si usa il numero d'onda, definito come il numero di lunghezze d'onda per centimetro ovvero: $\nu = \frac{1}{\lambda} cm^{-1}$. In questa unità di misura le frequenze dei modi vibrazionali fondamentali delle molecole sono compresi tra $50cm^{-1}$ e $4000cm^{-1}$.

anelastica è presente anche la componente Rayleigh, molto più intensa e di lunghezza d'onda identica a quella del laser che, ai fini della misura finale, rappresenta un rumore. Dunque un apparato di misura, al fine di massimizzare la sensibilità nei confronti della luce alle frequenze Raman, dovrebbe possedere un grande coefficiente di reiezione per la frequenza del laser. Gli elementi fondamentali di un apparato di acquisizione Raman sono

- una sorgente luminosa
- l'ottica di raccolta, che preleva la radiazione diffusa dal campione
- un analizzatore
- un rivelatore

Vediamo nel dettaglio questi elementi.
Il laser fornisce la radiazione di eccitazione. Se utilizzato assieme ad un microscopio, consente di illuminare porzioni di superficie del campione di dimensioni lineari dell'ordine del μm. Inoltre, come si avrà modo di ribadire più avanti, la gran parte dei campioni biologici genera un rumore di fondo, dovuto alla fluorescenza, che può raggiungere livelli tali da oscurare i segnali; per ridurre il livello di tale rumore vengono in genere acquisiti spettri multipli ed inoltre si effettua un controllo, secondo un protocollo che viene stabilito a priori per ogni tipo di apparato, sulla stabilità in potenza del laser, poichè il rumore di fondo varia al variare dell'intensità della radiazione incidente.
L'ottica di raccolta determina la quantità di luce Raman che entra nello strumento. Quando di parla di micro-spettroscopia Raman si intende che prima dello spettrometro si trovi un microscopio, che permette di illuminare porzioni ridotte di campione. La radiazione riflessa e diffusa dal campione viene quindi di nuovo raccolta dall'obiettivo del microscopio stesso e diretta verso lo spettrometro; tra le varie configurazioni di raccolta, in figura 6.2 si riporta la più frequente, detta di *back-scattering* poichè la direzione del fascio incidente sul sistema e quella della radiazione diffusa formano un angolo di 180°, che è anche quella utilizzata per l'apparato di misura in dotazione presso il laboratorio microRaman dell'ISMN. Qui si vede che la radiazione laser viene prima filtrata da un *pinhole*, in modo da eliminare anelli di diffrazione o rumore di *speckle* nell'intorno dello *spot* focalizzato. Una lente invia poi la radiazione uscente in un *beam splitter*, mediante il quale finisce nell'obiettivo del microscopio, e quindi sul campione da analizzare. Come già detto, il campione risponde emettendo radiazione riflessa e diffusa, che viene di nuovo raccolta dallo stesso obiettivo del microscopio. Il segnale del campione giunge di nuovo al *beam splitter*, che in genere ne invia una parte verso una telecamera e un'altra parte verso un *pinhole* regolabile, a valle della quale si trova l'ingresso dello spettrometro.
Analizzatore di spettro: La radiazione policromatica raccolta dall'obiettivo del microscopio deve essere analizzata da uno spettrometro. Per far

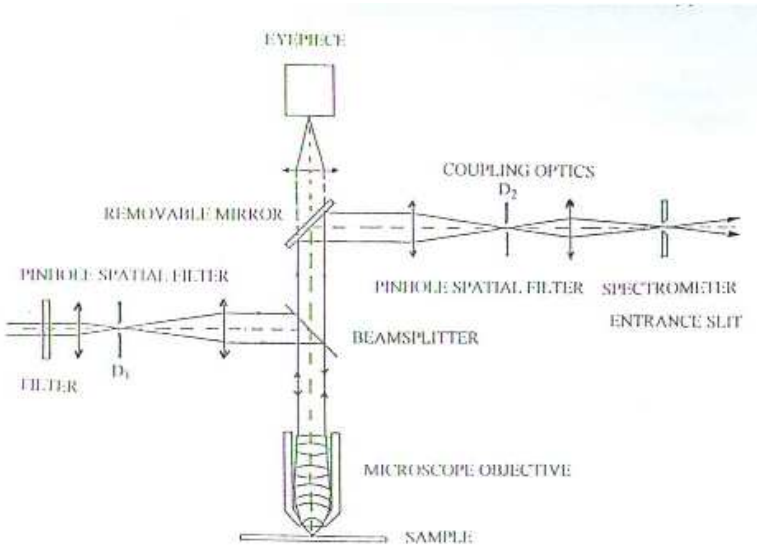

Figura 6.2: Schema di una configurazione di acquisizione Raman in *back-scattering*.

questo, viene misurato lo spettro rilevando l'intensità del segnale per ciascuna lunghezza d'onda risolta dallo strumento. La separazione dei vari contributi spettrali viene effettuata mediante un elemento dispersivo (anche se esistono analizzatori non-dispersivi che separano i vari contenuti in frequenza di un segnale mediante metodi interferometrici [78]) costituito in genere da un reticolo di diffrazione piano che produce una migliore e più efficiente dispersione rispetto ad un prisma. In figura 6.3 si mostra un diagramma di uno spettrometro dotato di un unico monocromatore. Come si vede, la radiazione entra nel monocromatore attraverso un piccola fenditura e viene riflessa da uno specchio verso il reticolo di diffrazione che disperde la luce policromatica nelle sue componenti lungo angoli differenti, secondo la ben nota legge di Bragg [16]

$$n\lambda = 2d \sin\theta. \tag{6.9}$$

dove n è un intero, d è il passo del reticolo e θ è l'angolo che il reticolo forma con l'asse dello strumento. Il reticolo produrrà una serie di immagini, della fessura di ingresso, che arrivano sul piano della fessura di uscita mediante un altro specchio. Tuttavia soltanto una di esse uscirà fuori dallo strumento e raggiungerà il rivelatore. Una volta che la radiazione sia stata filtrata in lunghezza d'onda dallo spettrometro giunge al rivelatore, in genere costituito da un dispositivo ad accoppiamento di carica (CCD) , che converte il segnale luminoso in segnale elettrico in modo che esso possa essere processato ed analizzato mediante la strumentazione elettronica/informatica oggi a disposizione.

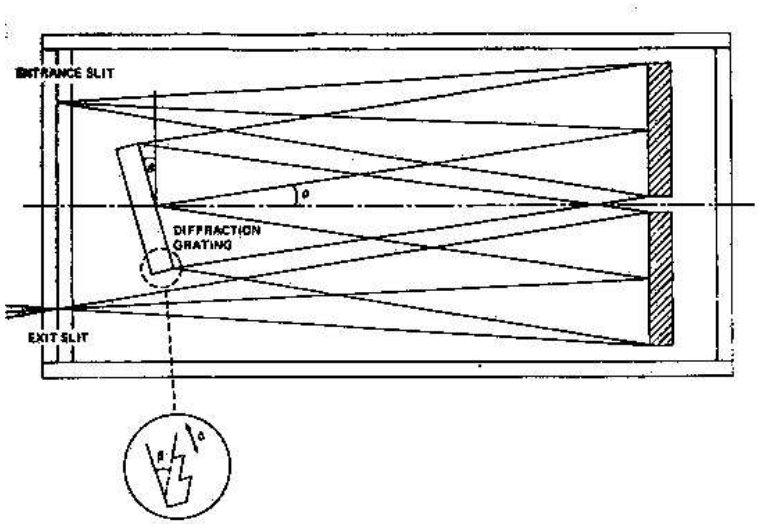

Figura 6.3: Schema di funzionamento di un singolo monocromatore.

Nella configurazione descritta, benchè sia possibile illuminare regioni di campione dell'ordine di $1\mu m$, è però critica la messa a fuoco. Infatti una non corretta messa a fuoco produce un drastico impoverimento del livello del segnale, il che può rappresentare un problema serio se il livello dei segnali del materiale oggetto di analisi è già di per sè molto basso, come accade spesso per la luce Raman prodotta da molecole biologiche adsorbite su solidi, in cui non si può neanche sopperire alle difficoltà di messa a fuoco accrescendo la potenza del laser, poichè si rischia di danneggiare irreversibilmente il campione.

6.3 Sorgenti di rumore

La componente principale di rumore, che si somma al segnale Raman desiderato, è dovuta alle cosiddette correnti di buio del rivelatore, che producono un segnale in uscita anche se non c'è alcun segnale di eccitazione in ingresso. Inoltre ogni spettrometro genera radiazione parassita (*stray light*) che si va a sommare al segnale di fondo. Un altro disturbo sul segnale è prodotto dai raggi cosmici, che si manifestano con dei picchi isolati e piuttosto intensi su tutto lo spettro in analisi. In genere l'effetto di queste sorgenti di rumore si riesce a diminuire con particolari accorgimenti, come può essere, ad esempio, il raffreddamento della CCD, che riduce la generazione termica dei portatori di carica, causa della corrente di buio. Il problema di riuscire ad avere un buon rapporto segnale/rumore dipende però anche dal campione che si sta analizzando. Infatti il laser può eccitare la risposta di fluorescenza del materiale, provocando in tal modo la comparsa di una banda piuttiosto am-

pia ed intensa, che può arrivare a coprire completamente il segnale Raman. Questo accade praticamente sempre quando si ha a che fare con molecole biologiche, che contengono spesso dei cromofori o impurità che, se eccitati, generano fluorescenza. Per ridurre l'effetto della fluorescenza, e quindi aumentare l'SNR, si può o eccitare il campione con una sorgente laser la cui lunghezza d'onda media sia vicina alle risonanze del materiale di cui esso è costituito, in modo da produrre un effetto risonante, con conseguente accrescimento del segnale, oppure utilizzare una sorgente nel vicino infrarosso, alle cui lunghezze d'onda la fluorescenza è molto ridotta. Ciò riduce l'effetto della fluorescenza, ma riduce anche il livello del segnale, la radiazione diffusa dipendendo dalla frequenza come ν^4. E' sempre bene effettuare un controllo sulla potenza effettiva emessa dal laser, nonchè tenere conto della sua deriva in frequenza. La deriva in frequenza, un fenomeno che per molti scopi è sicuramente trascurabile, in spettroscopia Raman è importante, poichè il posizionamento di una banda viene fatto relativamente al laser, che quindi rappresenta lo zero del sistema di riferimento. Per assicurarsi che il Raman *shift*, associato ad ogni banda, sia quello corretto, ovvero riferito alla riga nominale del laser utilizzato, si acquisisce preliminarmente uno spettro noto di un materiale di riferimento[6], che serva da paragone, per compensare eventuali offset.

6.4 Micro-spettroscopia Raman

La spettroscopia Raman fornisce informazioni sulla composizione chimica e sulla struttura molecolare della materia. Essa presenta molti vantaggi, se paragonata con altre tecniche esistenti, ma anche alcuni svantaggi. Tra i vantaggi possiamo ricordare il fatto che essa può essere realizzata su campioni *in situ* e *in vivo*. Inoltre è in genere una tecnica non invasiva, poichè nella maggior parte dei casi, il campione non subisce alcuna trasformazione irreversibile ad opera della misura e si può applicare a specie chimiche e molecole biologiche in ogni stato di aggregazione della materia. Un altro vantaggio è che il vetro è praticamente trasparente sia alla radiazione ottica incidente che alla luce Raman diffusa, permettendo, quindi, la costruzione di celle per studiare i campioni sotto differenti condizioni. In particolare si possono effettuare misure cambiando la temperatura o la pressione, e così via. La spettroscopia infrarosso, al contrario, necessita di celle costruite con materiale *ad hoc*, che possiedano delle finestre spettrali trasparenti per l'infrarosso, non potendo utilizzare il vetro comune che è opaco a quelle frequenze. Possiamo dire che al di sotto di $600cm^{-1}$, la spettroscopia a infrarossi soffre per la presenza di sorgenti di bassa intensità, rivelatori poco

[6]Nelle sessioni di misura oggetto della presente ricerca, si è sempre preso, come materiale su cui misurare l'offset del laser, un pezzetto di silicio cristallino, che possiede una banda di primo ordine posizionata a 519-520 cm^{-1}.

sensibili e per la necessità di ricercare finestre spettrali trasparenti.
Per ragioni analoghe essa può essere utilizzata su soluzioni acquose, poichè l'acqua possiede uno spettro Raman per il visibile molto debole, e quindi non rappresenta una grande sorgente di rumore. Questo è importante, innanzitutto perchè è possibile studiare il comportamento di molecole direttamente nel loro habitat naturale, come accade per molte molecole biologiche il cui stato e conformazione risultano notevolmente alterati se privati dell'ambiente acquoso. Ciò non è possibile a farsi con la spettroscopia a infrarossi, poichè anche l'acqua è totalmente opaca a quelle lunghezze d'onda. Per mezzo della spettroscopia Raman si possono analizzare piccoli volumi di materiale e non si ha la necessità di molecole sonda, che guidino ed inducano il segnale.
Malgrado questi importanti vantaggi, la tecnica Raman soffre di alcuni svantaggi. Occorre ricordare che le sezioni d'urto per le interazioni Raman sono piccolissime. Per particolari vibrazioni in molecole libere, raramente superano i 10^{-13} $\mathring{A}^2$, mentre l'area media ricoperta da una molecola adsorbita su di un supporto è di circa 10 $\mathring{A}^2$. Dunque in generale i segnali Raman sono molto deboli, spesso al punto tale da non riuscire a superare il livello del rumore. In certi casi, poi, il campione si può danneggiare. Per evitare che ciò accada occorre regolare accuratamente i tempi di acquisizione e la potenza del laser, in modo da non provocare danni al campione, e contemporaneamente rilevare il segnale desiderato. Si deve infine ricordare la presenza della fluorescenza, di cui si è già detto, che peggiora l'SNR.
Nel caso in cui si voglia rilevare la presenza di poche molecole adsorbite sulla superficie di un materiale, per quanto appena detto, si può sfruttare o gli effetti di risonanza oppure cercare di porsi nelle condizioni di attivazione del SERS (*Surface-Enhanced Raman Scattering*), un fenomeno di arricchimento del segnale, di cui dirà nella prossima sezione.

6.5 SERS (*Surface-Enhanced Raman Scattering*)

Il basso livello dei segnali Raman può essere aumentato, di molti ordini di grandezza, se si riesce ad instaurare un fenomeno di arricchimento del segnale, oggi noto come SERS. Tale effetto consiste nell'incremento della luce Raman diffusa da parte di specie adsorbite su delle superfici metalliche rugose. Prima della scoperta del SERS, si riteneva fosse impossibile rilevare la presenza di piccole quantità di materia adsorbita su superfici, a causa della bassa quantità di molecole legate alla superficie del campione e alle basse sezioni d'urto tipiche del Raman *scattering*. Il fenomeno è stato osservato per la prima volta su alcune molecole di piridina C_5NH_5 adsorbite su elettrodi di argento [79]; infatti, lo spettro Raman mostrava una banda che era diversa dai valori delle bande spettrali tipiche della piridina in soluzione acquosa. Inoltre l'incremento della sezione d'urto media per mo-

lecola fu stimato in circa 6 ordini di grandezza; un incremento notevole che ha posizionato, di diritto, la spettroscopia Raman tra le più avanzate tecniche per l'analisi di superficie. Sebbene siano stati proposti diversi modelli per spiegare il fenomeno, è oggi opinione comune che alla sua origine concorrano due meccanismi: le risonanze elettromagnetiche e l'arricchimento chimico. Il contributo elettromagnetico sarebbe dovuto all'incremento locale di campo, causato dalla rugosità della superficie metallica, che porterebbe, di conseguenza, anche ad un aumento del segnale scatterato. Il meccanismo chimico, invece, suppone che i fotoni incidenti producano un trasferimento di carica tra il metallo e la specie adsorbita, con la conseguente formazione di complessi chimici adsorbato-metallo. Ciò produrrebbe un aumento nella polarizzabilità e perciò (si veda la relazione 6.5) anche un aumento del segnale Raman. In ogni caso entrambi questi modelli considerano come fondamentale la presenza di una rugosità di superficie che attivi il processo. Quindi, per una superficie, l'essere SERS-attiva dipende dal cambiamento della sua struttura topografica, che può essere ottenuto mediante la deposizione di isole argento sulla superficie liscia, oppure per mezzo di un attacco chimico di una superficie di argento o mediante altro procedimento che produca una rugosità. Le dimensioni tipiche delle isole di metallo sono dell'ordine delle decine di nanometri, il che mostra interessanti campi di applicazione per la tecnica Raman nel crescente mondo delle nanostrutture.
Un materiale nanostrutturato, se permette di osservare l'effetto SERS, può trovare applicazione nel campo della sensoristica, come rivelatore di piccole quantità di sostanze adsorbite su di esso; se poi le sostanze adsorbite sono molecole biologiche, la cosa è ancora più interessante, potendo, se si seguono opportuni accorgimenti, effettuare delle misure *in situ* non invasive. E' in questo contesto che si pone l'attività sperimentale svolta in questa parte del lavoro di dottorato, nella quale sono stati analizzati, utilizzando la microspettroscopia Raman, diversi campioni di materiali semiconduttori nanostrutturati, su cui erano state adsorbite molecole biologiche. Infatti, una volta che si siano determinate le migliori condizioni sperimentali di misura[7] (che dipendono dal tipo di campione, dalla molecola adsorbita, dalle caratteristiche dell'apparato di misura), ottenute da uno strumento microRaman convenzionale (ovvero che ecciti il campione con un fascio laser, polarizzato linearmente, a profilo Gaussiano), si possiede un riferimento valido per confrontare gli effetti prodotti sul campione, nelle medesime condizioni, da eventuali campi diversi, che abbiano un diverso profilo di intensità e uno stato di polarizzazione inusuale, come quelli descritti nei capitoli precedenti. Nelle prossime sezioni, dopo aver descritto l'apparato e le tecniche di misura usati, si presenteranno i risultati fin qui ottenuti.

[7]Per *migliori condizioni di misura* si intende quelle condizioni che abbiano prodotto degli spettri di buona qualità, riproducibili, senza aver provocato alcun danno al campione.

6.6 Strumentazione, materiali e metodi

6.6.1 Apparato

L'apparato di misura utilizzato è un microspettroscopio Raman confocale della Renishaw, modello System2000. La figura 6.4 riporta una fotografia

Figura 6.4: Vista latero-anteriore del microspettrometro Raman in dotazione presso il laboratorio microRaman dell'Istituto Studi Materiali Nanostrutturati (ISMN) del CNR, Montelibretti, Roma.

della vista latero-anteriore dello strumento, mentre quella 6.5 riporta la vista latero-posteriore. Esso lavora in configurazione di *back-scattering*, con una radiazione di eccitazione fornita da un laser ad Argon ionizzato ad onda continua, con lunghezza d'onda pari a $514,5nm$ e potenza massima $25mW$. Lo spettrometro permette di analizzare spettri in un range che parte da pochi cm^{-1} (per essere sufficientemente lontani dalla riga del laser) fino a $3300cm^{-1}$ circa, con risoluzione spettrale di circa 1 cm^{-1}. Il rivelatore è un dispositivo ad accoppiamento di carica (CCD), raffreddata mediante un raffreddatore termoelettrico. Tutti i campioni sono stati posizionati direttamente al di sotto del microscopio, dotato di obiettivi 5x-20x-50x, utilizzando un vetrino da laboratorio come piano di appoggio, tranne nel caso delle misure delle molecole biologiche in soluzione acquosa, che sono state precedentemente

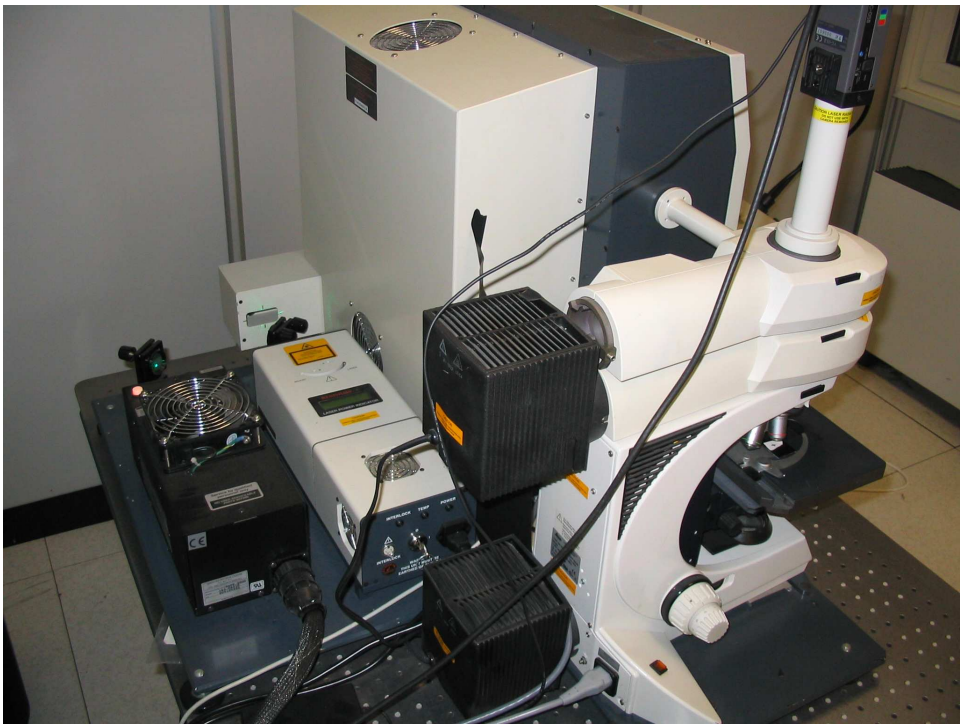

Figura 6.5: Vista latero-posteriore del microspettrometro Raman in dotazione presso il laboratorio microRaman dell'Istituto Studi Materiali Nanostrutturati (ISMN) del CNR, Montelibretti, Roma.

inserite dentro dei capillari di vetro, di diametro $\phi = 1$ mm e lunghezza pari a 10 cm, e poggiati a loro volta sul vetrino.

6.6.2 Materiali e metodi

Le molecole studiate sono state disciolte in acqua e si sono ottenuti dei buoni spettri inserendole nei capillari di vetro. Una volta inserite nel capillare, si è provveduto a misurarle, poggiandole direttamente su vetrino. Il problema principale dell'acquisizione Raman per un liquido è risultata essere la messa a fuoco esatta sul piano del campione. Infatti, se da un lato l'intensità dei segnali Raman per i liquidi è in genere elevata, essi producono anche un forte segnale di fluorescenza, che può arrivare a coprire completamente il segnale desiderato. Lo strumento permette di controllare la messa a fuoco mediante due sorgenti luminose: il laser e la luce bianca prodotta da una lampada incandescente, posizionata al di sotto del microscopio.
Mediante due ghiere inserite nel microscopio, è possibile decidere se inviare sul campione la radiazione laser oppure la luce bianca. Il microscopio è interfacciato con una telecamera, che raccoglie il segnale riflesso dal campione e permette di controllare il piano di fuoco. Mentre per i campioni solidi la

valutazione del fuoco si riesce a fare senza problemi direttamente con il laser, controllando che lo spot abbia un'espansione simmetrica e ricercando la posizione di minimo *spot*, con i liquidi ciò è molto difficile a farsi. In questi casi si possono ottenere risultati migliori cercando il fuoco con la luce bianca. Anche se, in linea di principio, i due fuochi, quello relativo al laser e quello della lampada, non sono strettamente coincidenti, i risultati ottenuti in questo modo sono stati più che soddisfacenti. Per quanto riguarda l'adsorbimento delle sostanze biologiche sui dispositivi, questo si è realizzato immettendo la soluzione acquosa contenente la molecola in un *beker*, e inserendovi poi il materiale solido. I tempi di immersione sono stati di volta in volta variabili, ma non si è mai scesi al di sotto dei 12-15 minuti per campione. Una volta estratti dal liquido, i campioni sono stati messi in un contenitore con acetonitrile (`ACN`) liquido, e soggetti a agitazione ultrasonica, in un sonificatore, in modo da permettere il distacco dalle superfici del campione delle molecole non adsorbite. Dopo di che si è proceduto a misurare gli spettri Raman, confidando che gli eventuali segnali presenti non avrebbero potuto derivare da molecole non fortemente legate sulla superficie del materiale solido, ma soltanto dalle specie adsorbite. Le misure sono state effettuate a temperatura ambiente.

Campioni semiconduttori

Per quanto riguarda i campioni semiconduttori, ne sono stati utilizzati due diversi tipi. Il primo campione è costituito da uno strato epitassiale di arseniuro di gallio, `GaAs`, sul quale sia stato depositato un film di isole di atomi di argento, già utilizzato in un recente lavoro per rilevare altre molecole mediante SERS [80]. La struttura del film può essere considerata come un *array* casuale di singole nanoparticelle di argento, con dimensioni medie che vanno dai $30 - 40nm$, depositati in modo uniforme su tutta la superficie. In figura 6.6 si riporta un'immagine al microscopio elettronico di un campione di questo tipo, in cui si nota che, nelle zone metallizzate, la distribuzione delle isole è piuttosto uniforme. Il secondo tipo di campione studiato sono stati *self-assembled quantum dots* di arseniuro di indio (`InAs`) su arseniuro di gallio (`GaAs`). Immagini al microscopio a forza atomica mostrano la struttura di un array di isole di `InAs` di diametro medio pari a circa $40nm$, altezza pari a $10nm$ con distanza media tra le isole di circa $60nm$. La ragione per cui è interessante investigare l'adsorbimento su tali strutture è di duplice natura. Da un lato, infatti, esse sono oggi molto studiate come dispositivi a causa delle peculiari caratteristiche quanto-meccaniche derivanti dalla bassa dimensionalità, con interessanti applicazioni nel calcolo, nella sensoristica, ecc. D'altro canto, la presenza dei *quantum dots* fornisce già una certa rugosità della superficie del campione, il che potrebbe produrre un arricchimento del segnale come detto in sezione 6.5.

Molecole biologiche

Per quanto riguarda le molecole biologiche, sono state studiate due tipi di sostanze: l'adenina e la tirosina. L'adenina è un derivato purinico dotata di due anelli a cinque e a sei elementi, ed è una delle due basi azotate puriniche caratteristiche dei nucleotidi degli acidi nucleici DNA e RNA. Tramite due legami a idrogeno, nel DNA

Figura 6.6: Immagine al microscopio elettronico di un campione di `GaAs` con deposito di isole di `Ag`.

si lega alla Timina (che è una base azotata pirimidinica) e nell'RNA si lega all'Uracile (anch'essa base pirimidinica). La precisa struttura tridimensionale delle varie purine e pirimidine è stata dedotta da analisi di diffrazione ai raggi X. Tali analisi hanno messo in evidenza che mentre le pirimidine sono molecole panari, le purine sono *quasi* planari. I gruppi funzionali importanti, che partecipano alla formazione dei ponti idrogeno, sono i gruppi amminici. La molecola è relativamente insolubile in acqua ed è un composto debolmente basico che può esistere in due o più forme tautomeriche a seconda del pH. In figura 6.7 si riporta la sua struttura molecolare. Per quanto riguarda la

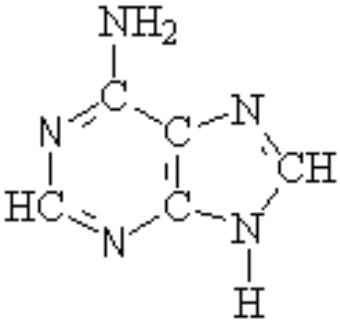

Figura 6.7: Struttura chimica dell'adenina

tirosina possiamo dire che essa è uno degli amminoacidi costituenti le unità

strutturali di base delle proteine. La sua molecola è chirale ed è dotata di un anello aromatico, contenente un gruppo ossidrilico, che la rende meno idrofobica della fenilalanina (un altro amminoacido); questo gruppo, inoltre, è reattivo, al contrario delle catene laterali praticamente inerti della maggior parte degli altri amminoacidi. Negli esseri umani non è un amminoacido essenziale, poichè l'organismo umano è in grado di sintetizzarla. La tirosina è biologicamente importante in quanto precursore di vari ormoni come la tiroxina, dopamina e adrenalina. La sua struttura chimica è riportata in figura 6.8

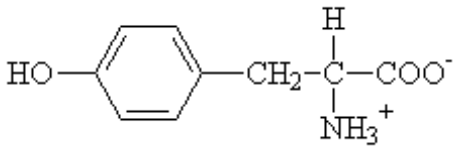

Figura 6.8: Struttura chimica della tirosina

6.7 Risultati sperimentali

6.7.1 Adsorbimento di adenina

Incominciamo con il vedere quale è risultato essere lo spettro per l'adenina in soluzione acquosa. Nelle figure 6.9-6.10 si riporta lo spettro dell'adenina liquida, all'interno del capillare di vetro di cui si è già detto precedentemente, eccitata dalla radiazione laser di lunghezza d'onda $514.5nm$ del laser ad Argon. Nelle figure sono riportati i valori delle bande osservate. Per eliminare il contributo allo spettro dovuto al vetro del capillare, si riporta in figura 6.11 lo spettro del capillare da solo. Come si nota, esso presenta un segnale piuttosto intenso già intorno ai $500cm^{-1}$, con una banda evidente posizionata sui $1260cm^{-1}$; questo fondo, sommato alla risposta di fluorescenza prodotta dalla molecola stessa, non permette l'osservazione di ulteriori bande dell'adenina al di sopra dei $1200cm^{-1}$ circa.
Acquisito lo spettro dell'adenina, si è passati allo studio della diffusione Raman della medesima molecola, una volta adsorbita su di un nostro campione. In particolare essa è stata adsorbita sul campione di `GaAs` con un *film* di isole di `Ag` descritto sopra. In via preliminare si è provveduto ad effettuare una misura del semiconduttore senza molecola adsorbita, in modo da avere un riferimento per le misure successive. Le figure 6.12-6.13 riportano lo spettro del `GaAs` senza molecola adsorbita. Da esse si vede che il fondo di fluorescenza per questi dispositivi incomincia intorno ai $1600cm^{-1}$. Successivamente un pezzetto di tale materiale è stato immerso in soluzione contenente adenina per circa 2 ore. Dopo di che è stato sciacquato in `ACN` e sottoposto ad

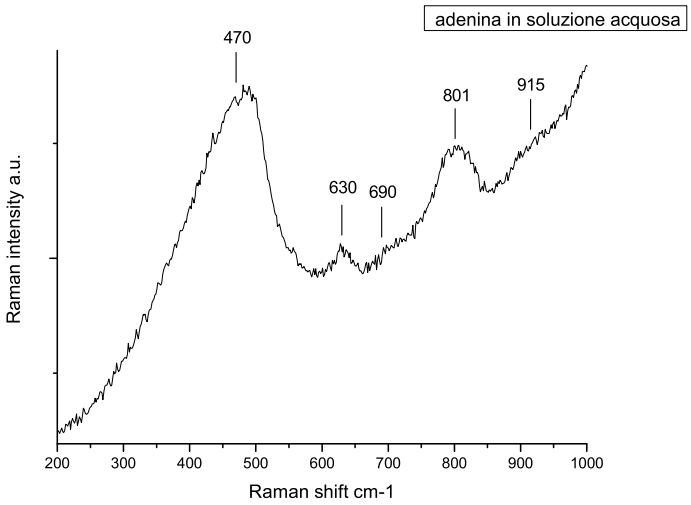

Figura 6.9: Spettro dell'adenina liquida, eccitata da sorgente a $514.5nm$, contenuta in capillare di vetro. Intervallo $[200, 1000]$ cm^{-1}.

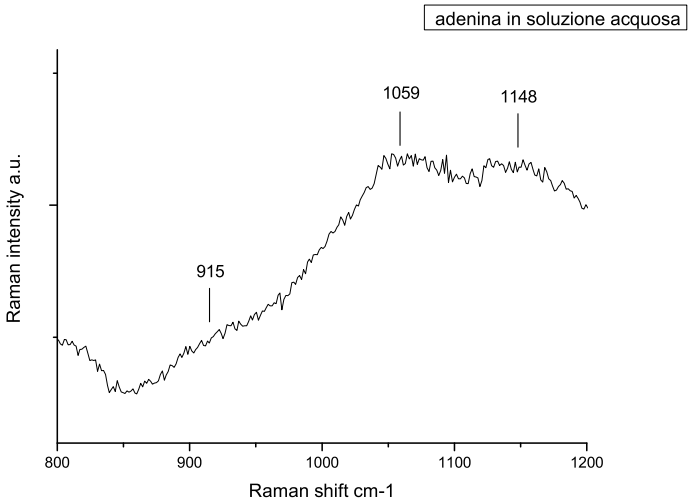

Figura 6.10: Spettro dell'adenina liquida, eccitata da sorgente a $514.5nm$, contenuta in capillare di vetro. Intervallo $[800, 1200]$ cm^{-1}.

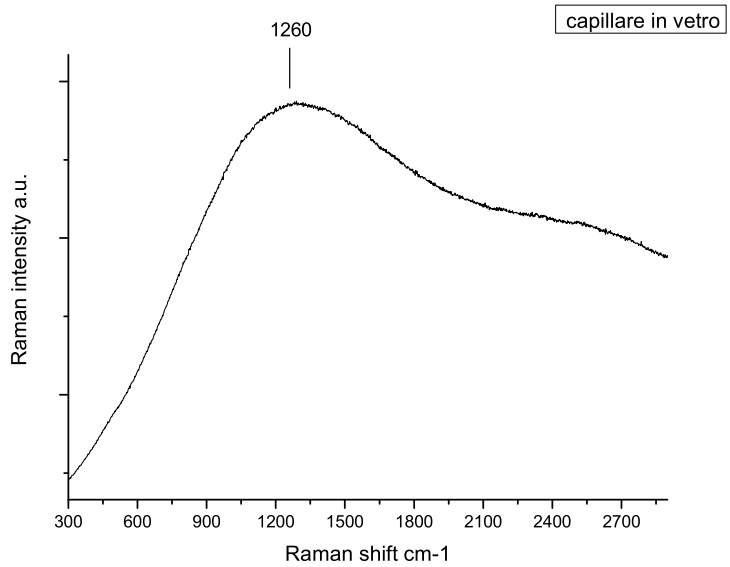

Figura 6.11: Spettro del capillare in vetro, diametro $1mm$, utilizzato per contenere le molecole in soluzione acquosa. Intervallo $[300, 2900]cm^{-1}$.

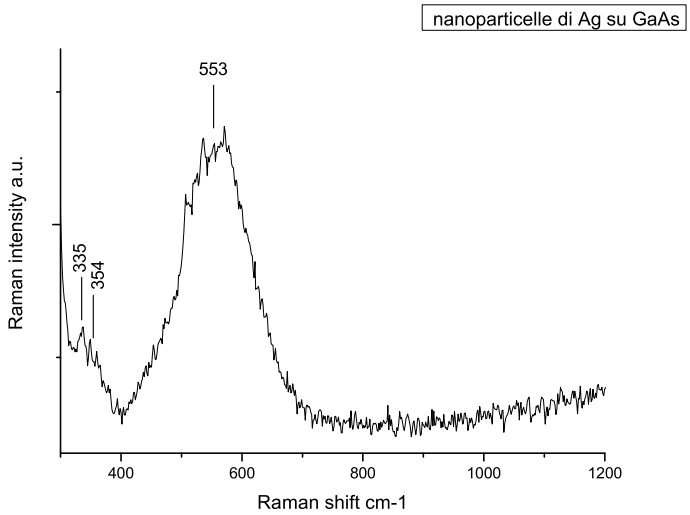

Figura 6.12: Spettro di `GaAs` cristallino con isole di `Ag`. Intervallo $[300, 1200]cm^{-1}$.

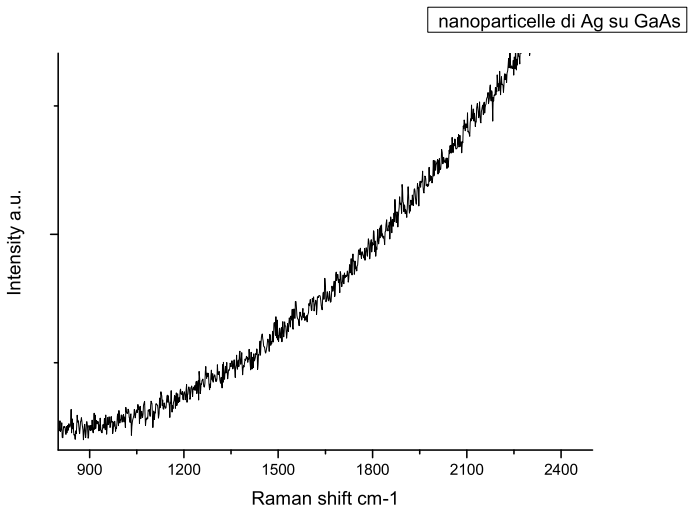

Figura 6.13: Spettro di GaAs cristallino con isole di Ag. Intervallo $[800, 2500]cm^{-1}$.

agitazione ultrasonica per 15 minuti. Uno schema che mostra l'adsorbimento della molecola sulle isole di argento su GaAs è riportato in figura 6.14 [80]. Le misure realizzate sono riportate in figura 6.15-6.16 E' evidente la comparsa di nuove bande, assenti negli spettri del campione senza molecola adsorbita. In particolare si osserva la comparsa di una banda a $604cm^{-1}$, di una piccola banda intorno a $657cm^{-1}$ e di una banda piuttosto ampia a $819cm^{-1}$. Inoltre compaiono anche due ampie bande a $1362cm^{-1}$ e $1577cm^{-1}$. Poichè sul campione esistevano zone con deposito di argento e zone prive di deposito (al microscopio ottico le parti con metallizzazione appaiono leggermente più scure) si è provveduto anche ad effettuare la misura sulle zone senza metallizzazione. Gli spettri così ottenuti sono del tutto simili a quelli del campione senza molecola, come in figura 6.12-6.13. Questo conferma che nelle figure 6.15-6.16 il segnale dell'adenina è arricchito ad opera del SERS. Per quanto riguarda le bande osservate possiamo tentare di assegnarle a particolari modi vibrazionali della molecola, utilizzando quanto disponibile in letteratura al riguardo [81], [82], [83], [84]. In particolare la banda a $604cm^{-1}$ può essere assegnata alle deformazioni planari (di *squeezing*) dei componenti dell'anello a sei elementi della molecola mentre la banda a $657cm^{-1}$ alle deformazioni non planari (modi di *wag*) dell'anello a cinque elementi della stessa. Per quanto riguarda la banda a $819cm^{-1}$ riteniamo di poterla assegnare alle vibrazioni derivanti dalla deformazione (*wag* non planare) dell'anello a sei elementi. In realtà, se andiamo a vedere lo spettro dell'adenina liquida troviamo che tale banda è posizionata attorno a $801cm^{-1}$, valore questo che coincide con

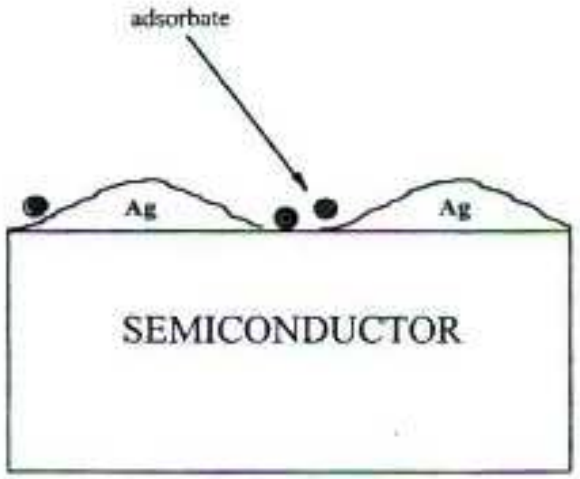

Figura 6.14: Isole di `Ag`, accresciute su strato di `GaAs`, e adsorbimento di molecole in superficie.

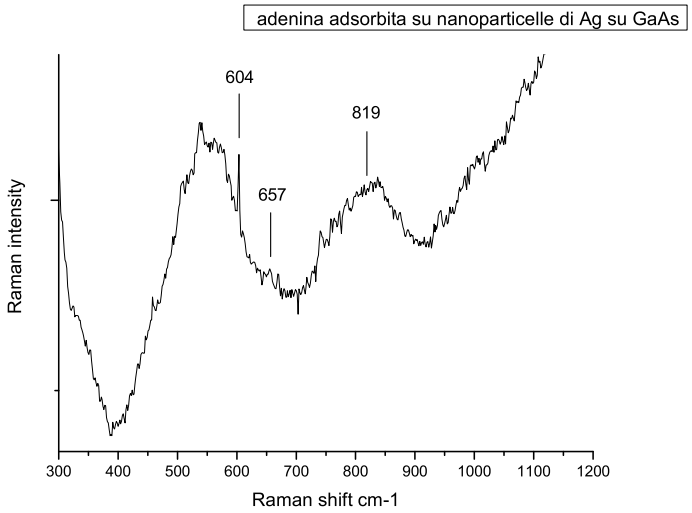

Figura 6.15: Spettro del `GaAs` con isole di argento dopo adsorbimento di molecole di adenina. Intervallo $[300, 1200]cm^{-1}$.

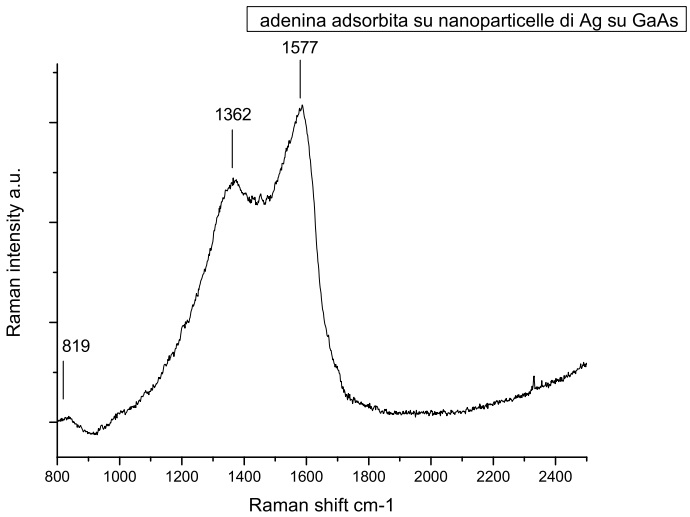

Figura 6.16: Spettro del GaAs con isole di argento dopo adsorbimento di molecole di adenina. Intervallo $[800, 2500]cm^{-1}$

quanto riportato in altri lavori presenti nella letteratura specifica, il che fa supporre che sia intervenuto qualche effetto di interazione superficiale (tra molecola e campione) responsabile dello *shift* di circa $18cm^{-1}$ osservato nel segnale della molecola adsorbita sulla nanostruttura. Per quanto riguarda la banda a $1362cm^{-1}$ possiamo considerarla come dovuto al modo vibrazionale associato allo stiramento (modo di *strech*) dei legami C-N, presenti in entrambi gli anelli della molecola. Per quanto riguarda la banda a $1577cm^{-1}$ essa potrebbe derivare principalmente dal moto scissorio del gruppo amino presente nella molecola (si veda nel lavoro di Giese e McNaughton [81], in cui vengono messi a confronto risultati sperimentali, anche prodotti da differenti autori, e risultati numerici, sul SERS di adenina su superfici di argento). Possiamo concludere quindi di aver rilevato tracce di molecola adsorbita sulla nanostruttura grazie all'arricchimento del segnale dovuto al SERS.

6.7.2 Adsorbimento di tirosina

Anche per questa molecola, occorre innanzitutto fornirsi dello spettro Raman della specie in soluzione acquosa. Della polvere di molecola pura è stata disciolta in acqua in modo da produrre una soluzione satura. La soluzione così ottenuta è stata inserita in un capillare dal diametro di $\phi = 1mm$ e lunghezza $100mm$. Gli spettri ottenuti, con sopra riportati le bande Raman osservati, sono mostrati nelle figure 6.17-6.18. Anche in questo caso una intensa fluorescenza, sommata al segnale prodotto dal capillare in vetro, im-

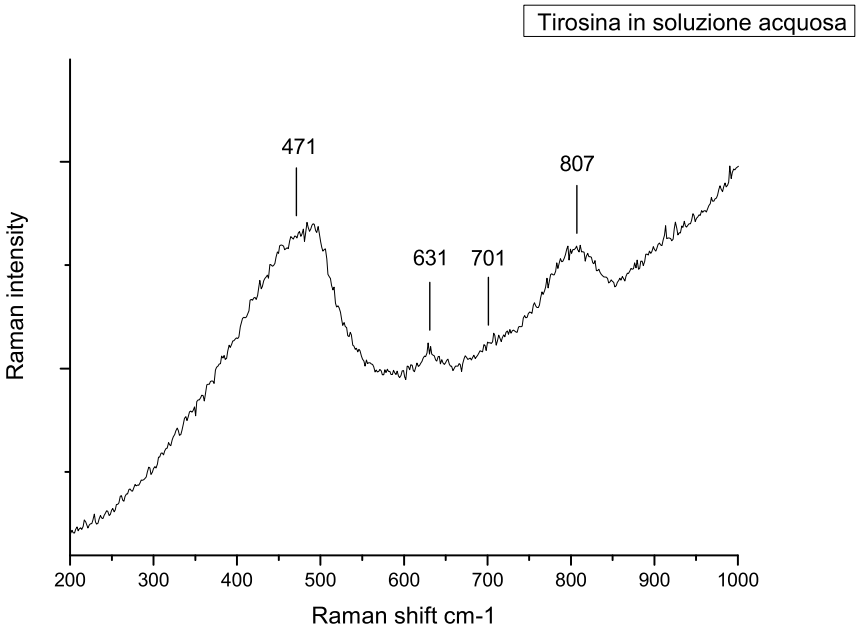

Figura 6.17: Spettro della soluzione acquosa satura di tirosina. Intervallo $[200, 1000]cm^{-1}$.

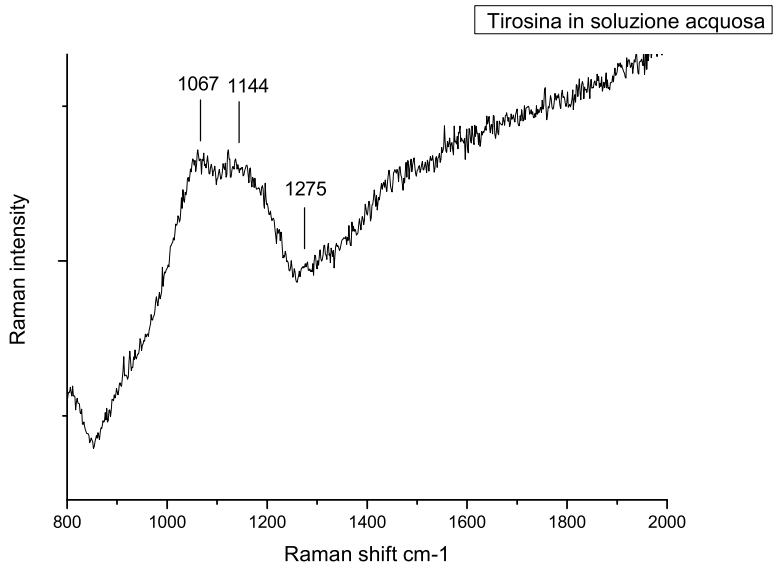

Figura 6.18: Spettro della soluzione acquosa satura di tirosina. Intervallo $[800, 2000]cm^{-1}$.

pedisce di osservare segnali sopra i $1300cm^{-1}$ circa. Per quanto riguarda la regione al di sotto di tale limite, possiamo notare una certa somiglianza tra lo spettro caratteristico dell'adenina e quello della tirosina, entrambe in soluzione acquosa. In effetti, se si vanno a guardare le strutture delle due sostanze riportate nelle figure 6.7 e 6.8, si nota che esse hanno elementi in comune, essendo dotate, per esempio, entrambe di un anello a sei elementi così come di un gruppo ammino.
Diversamente da quanto fatto con l'adenina, per la tirosina è stato analizzato l'adsorbimento sul campione semiconduttore a *quantum dots* del tipo `InAs/GaAs` già precentemente descritto. In questo tipo di campioni la rugosità di superficie non è stata ottenuta mediante deposizione di `Ag`, ma sfruttando proprio la topografia data dai *quantum dots*. Dato che la presenza dei *quantum dots* fornisce già una certa rugosità della superficie del campione, è stato ipotizzato che ciò potrebbe produrre un arricchimento del segnale come detto in sezione 6.5. In effetti, la prima osservazione di SERS da molecole adsorbite su *quantum dots* è piuttosto recente (si veda nel lavoro di Quagliano [85], in cui è stato osservato adsorbimento di piridina, C_5H_5N, su *quantum dots* `InAs/GaAs`, con un fattore di arricchimento stimato nell'ordine di 10^3) e rimane da studiare il fenomeno al variare del tipo di nanostruttura e specie adsorbita. Volendo rivelare tracce di tirosina sulla nanostruttura a punti quantici `InAs/GaAs`, occorre innanzitutto acquisire il

segnale Raman del campione da solo. Lo spettro ottenuto è riportato nelle figure 6.19-6.20.

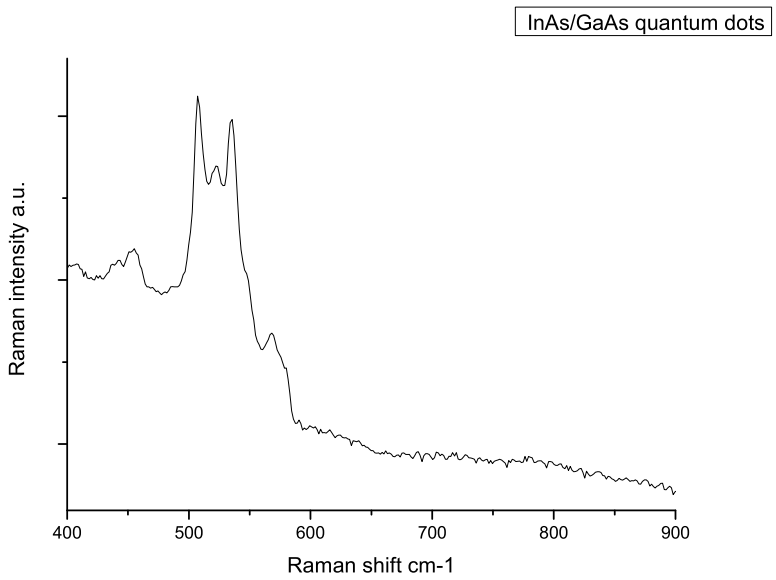

Figura 6.19: Spettro Raman di campione di *quantum dots* di `InAs/GaAs`. Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$.

Tali spettri sono stati ottenuti focalizzando la radiazione a $514.5nm$ del laser ad Argon con un obiettivo $50\times$ e utilizzando un tempo di integrazione di 150 secondi. Inoltre sono stati accumulati sequenze di 3 spettri per intervallo. Dopo di che si è provveduto ad immergere il campione nella soluzione acquosa contenente tirosina. Una volta estratto dalla soluzione esso è stato sciacquato in `ACN`, sottoposto ad una breve agitazione ultrasonica e poi misurato. Le bande non osservate nel campione da solo e invece presenti nel campione dopo immersione in tirosina sono riportati nelle figure 6.21-6.23. Da tali figure è evidente la comparsa di numerose bande, non presenti nello spettro del semiconduttore da solo, che possiamo con ragionevolezza attribuire alla presenza della molecola in superficie. Ricordiamo che l'immersione nel solvente `ACN`, e la successiva sonicazione, vengono effettuati per rimuovere parti di molecola non adsorbita. In effetti un'analisi interessante può essere andare a vedere il segnale Raman prodotto dal campione senza applicare l'agitazione ad ultrasuoni, ma soltanto sciacquandolo abbondantemente in acetonitrilo. Gli spettri ottenuti in tal modo sono riportati nelle figure 6.24-6.26. E' evidente in tal caso la comparsa di un numero maggiore di bande rispetto agli spettri ottenuti dopo sonicazione. Anche le bande già presenti risultano notevolmente accresciute in intensità. In questi spettri si ritrovano

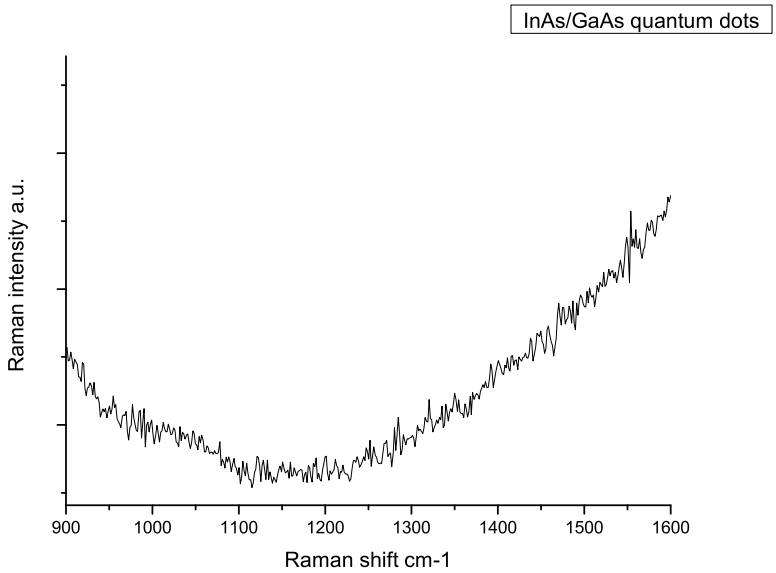

Figura 6.20: Spettro Raman di campione di *quantum dots* di `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$.

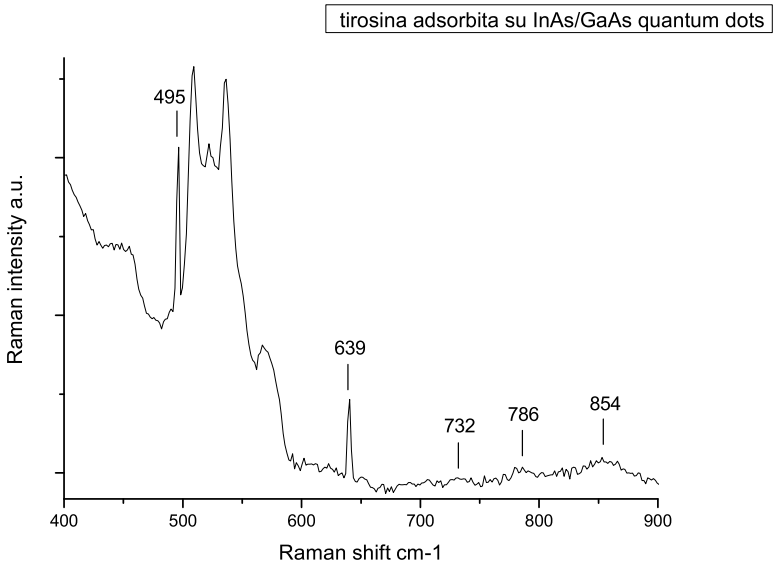

Figura 6.21: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs` . Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$.

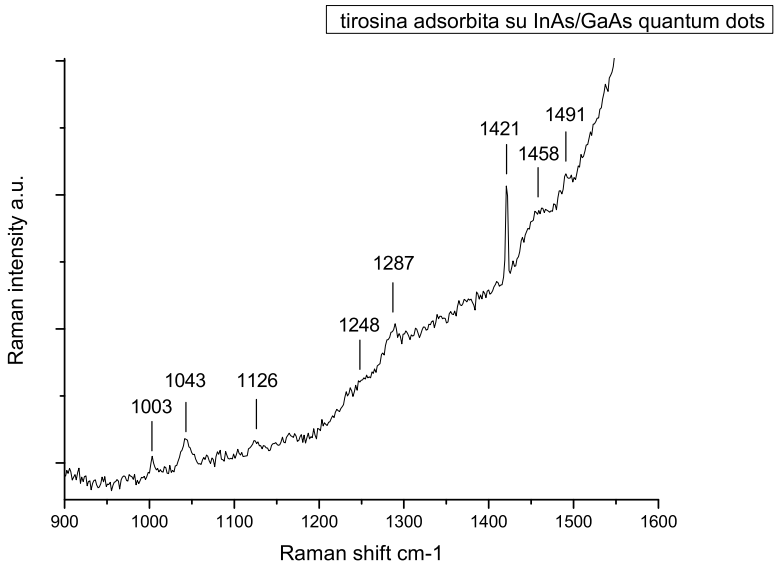

Figura 6.22: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$.

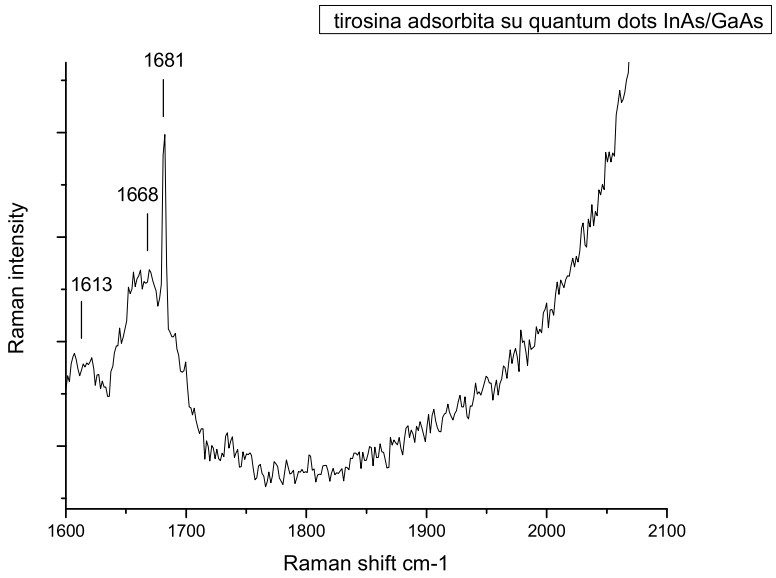

Figura 6.23: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[1600, 2200]cm^{-1}$.

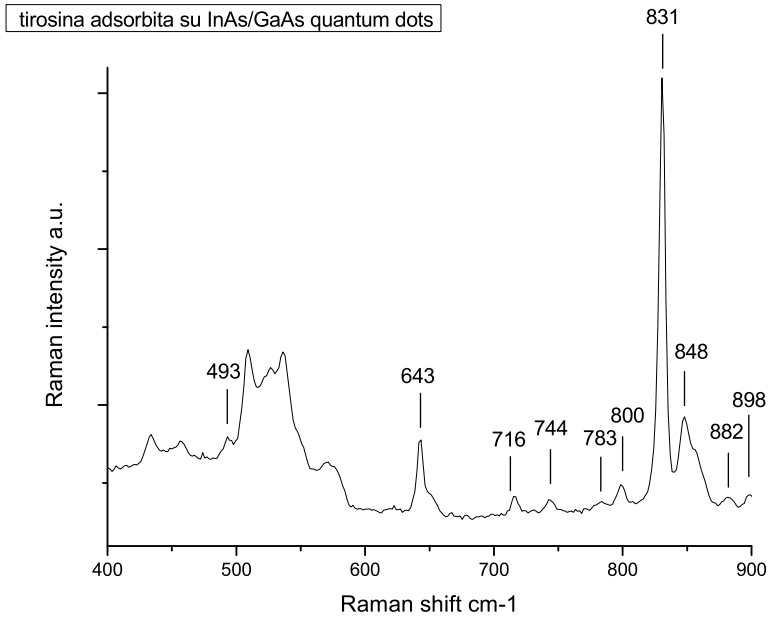

Figura 6.24: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica.

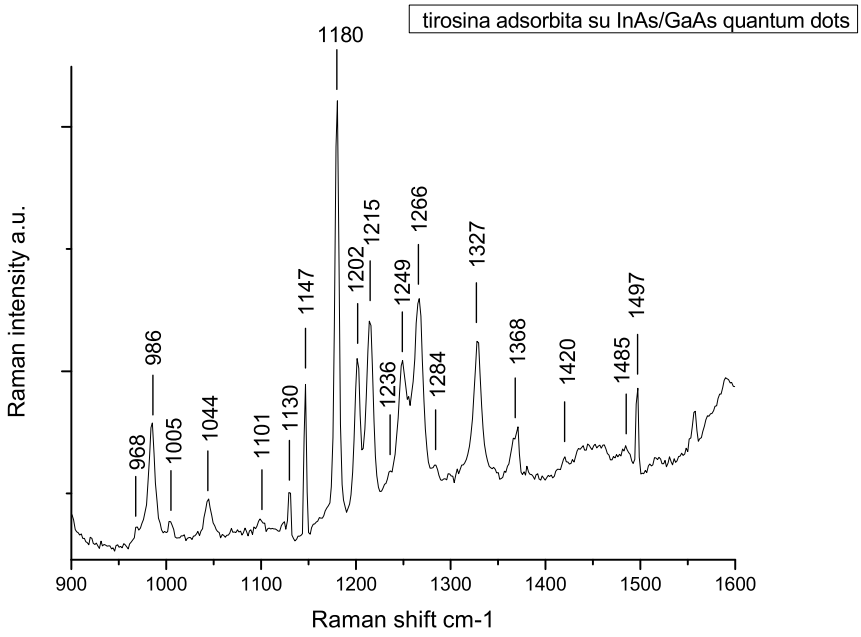

Figura 6.25: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica.

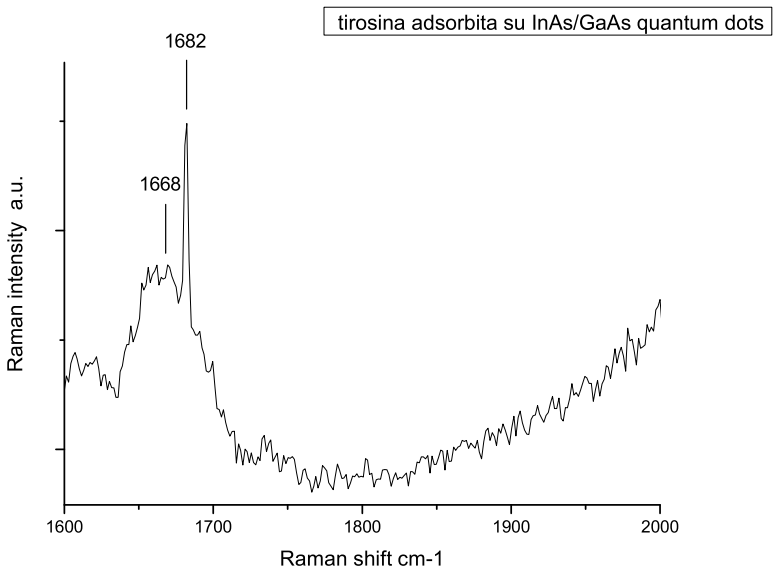

Figura 6.26: Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[1600, 2000]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica.

alcune caratteristiche note dello spettro della tirosina. In particolare si noti, in figura 6.24, la comparsa piuttosto evidente del doppietto a $831 - 848cm^{-1}$. Il rapporto tra le intensità relative tra queste due bande si ritiene possa essere legato allo stato del legame idrogeno e della ionizzazione del gruppo OH della tirosina stessa. Inoltre, se ricordiamo che la tirosina è un amminoacido contenuta in molte proteine animali e vegetali, risulta che il rapporto tra le intensità relative del doppietto dà conto del fatto che la molecola sia direttamente esposta verso l'esterno della proteina (banda a $848cm^{-1}$ più intensa) oppure sepolta all'interno della proteina stessa (banda a $831cm^{-1}$ più intensa).

Conclusioni

Prima di concludere il presente lavoro di tesi, è opportuno riepilogare brevemente quali erano gli obiettivi della ricerca di dottorato, quali risultati sono stati raggiunti e quali sviluppi futuri sono per essa prevedibili. Per quanto attiene alla parte predominante del lavoro svolto, ovvero quello relativo alla ricerca di nuove soluzioni di campo per l'ottica parassiale, possiamo dire di aver ottenuto dei risultati piuttosto interessanti. Infatti da un lato, immergendo l'ottica parassiale nell'ambito della teoria dei gruppi di Lie, siamo stati in grado di dimostrare l'esistenza di un'intera classe di nuove soluzioni, ottenute da assegnate soluzioni di partenza riscalando opportunamente le variabili spaziali e aggiungendo un termine di inviluppo Gaussiano bidimensionale. Questo risultato ha da un canto messo in risalto lo stretto legame esistente tra l'equazione parassiale e la funzione Gaussiana, e dall'altro permesso di introdurre l'espressione in forma chiusa per la propagazione libera di un'intera famiglia di fasci luminosi, i cosiddetti fasci pseudo non-diffrangenti, che rappresentano la versione fisicamente realizzabile dei famosi campi non-diffrangenti, e che trovano oggigiorno impiego in numerosi settori di applicazione. Inoltre, una volta dotati dei vettori generatori delle trasformazioni di simmetria per l'ottica parassiale, si è anche provveduto ad effettuare un'analisi sistematica delle principali grandezze conservate durante la propagazione di una generica soluzione parassiale. Questo si è reso possibile grazie alla fusione dei risultati della teoria dei gruppi e di una descrizione Lagrangiana dell'ottica parassiale, che può a tutti gli effetti essere trattata come le moderne teorie di campo classiche. In particolare, una volta individuata una Lagrangiana che permetta di ottenere, mediante un principio variazionale, le corrette equazioni del moto per i campi, è stato possibile introdurre il tensore canonico energia-momento, grazie al quale si riescono a scrivere le forme per l'energia, le correnti e i momenti, nonchè le leggi di conservazione associate a particolari simmetrie del sistema. Sono state studiate nel dettaglio l'invarianza traslazionale, rotazionale attorno all'asse medio di propagazione e l'invarianza in scala. Un'osservazione interessante è che si è riusciti a derivare un'espressione per il momento angolare orbitale per il campo, partendo *esclusivamente* da una teoria parassiale scalare, senza fare alcuna ipotesi aggiuntiva circa il campo o il suo stato di polarizzazione, come invece si vede usualmente fare nei numerosi lavori che trattano la derivazio-

ne del momento angolare per fasci ottici parassiali. Si è inoltre evidenziato come, una teoria apparentemente semplice come quella parassiale scalare, già possieda al suo interno la condizione di trasversalità dei momenti lineari, condizione essenziale per avere una componente di momento angolare conservata lungo l'asse di evoluzione. Uno sviluppo interessante a queste ricerche potrebbe essere l'estensione delle analisi di simmetria al caso vettoriale, magari analizzando le proprietà di simmetria di campi a polarizzazioni inusuali, ed andare a vedere quale forma assumano le principali quantità conservate per il campo, come può essere il momento angolare totale (comprensivo cioè sia della parte orbitale dipendente dal profilo di campo che di quella di spin dipendente dallo stato di polarizzazione). Sempre nello studio dell'ottica parassiale, sono stati introdotti per la prima volta i fasci di Lorentz così come quelli super-Lorentziani. In particolare si è messo in evidenza come per questi tipi di campi sia possibile dare la propagazione in forma analitica; inoltre si è mostrato come i fasci Lorentziani costituiscano una base per descrivere la propagazione di un fascio super-Lorentziano. Tenuto conto che nella definizione di un fascio super-Lorentziano si ha la libertà di poter scegliere la forma di una generica funzione, priva di singolarità, a moltiplicare, si è mostrato che essa può essere scelta in modo da richiedere l'esistenza di una famiglia, costituita da un numero finito di elementi, di campi ortogonali. Inoltre si è anche mostrato come tali campi possano essere un buon (e semplice) modello descrittivo per la propagazione di altri profili di campo, la cui propagazione in forma chiusa non sia ancora al momento nota. In particolare si è mostrata come l'approssimazione ottenuta nel simulare la propagazione di un fascio Gaussiano oppure, in generale, di un fascio di Hermite-Gauss, tenga piuttosto bene conto delle usuali caratteristiche propagative di tali campi.
Per quanto riguarda la seconda parte della tesi si è portato avanti un'attività sperimentale di micro-spettroscopia Raman presso l'Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati del CNR. Oggi c'è un forte interesse nel cercare di utilizzare tecniche di indagine sperimentali che facciano uso di radiazione laser come sorgente di eccitazione dei campioni, dotata di nuovi profili di campo e stati di polarizzazione non convenzionali, come ad esempio stati di polarizzazione radiali o azimutali. In linea di principio, infatti, la risposta di un materiale è funzione dello stato di polarizzazione del campo incidente su di esso, per cui è lecito attendersi effetti osservabili prodotti da tali nuovi tipi di sorgenti; occorre però dire che, ad oggi, la gran parte gli apparati non è ancora progettata per eccitare direttamente i campioni con campi con tali caratteristiche. In questo senso va inquadrata l'attività sperimentale svolta. In particolare ci si è dedicati alla ricerca di segnali Raman prodotti da molecole biologiche adsorbite sulla superficie di materiali nanostrutturati, quando essi vengano eccitati con una sorgente standard (modellizzata da un fascio Gaussiano linearmente polarizzato). Si è cercato quindi, nell'ambito di un obiettivo sperimentale di avanguardia, quale è la rivelazione di piccole quantità di sostanze biologiche adsorbite su superfici di campioni particolari

(come, per esempio, i *quantum dots* a semiconduttore), di trovare le migliori condizioni sperimentali che permettessero di rivelare la diffusione Raman dovuta alle molecole adsorbite, in modo da avere un termine di confronto con quanto eventualmente si potrà ottenere eccitando lo stesso sistema con una radiazione non convenzionale. Importanti risultati sono stati l'osservazione, per la prima volta, di tracce di adenina adsorbita su uno strato di `GaAs` su cui erano state depositate delle nanoparticelle di argento in modo da ottenere una superficie SERS-attiva, nonchè quelle di tirosina adsorbita su *quantum dots* del tipo `InAs/GaAs`. Questi risultati mettono in evidenza la grande sensibilità che la micro-spettroscopia Raman ha nel rivelare piccole quantità di sostanze (siano esse impurità o molecole organiche di un qualche interesse) presenti su superfici a semiconduttore; ciò può essere molto importante per la caratterizzazione di nuovi dispositivi ottenuti da processi di costruzione in cui vengano integrati materiali inorganici (per esempio le nanostrutture a semiconduttore) e sistemi biologici, e rappresenta certamente uno stimolo a proseguire la ricerca in tale direzione.

Appendice A

Trasformata di Fourier-Bessel

A.1 Problemi di Sturm-Liouville

Se consideriamo la seguente equazione differenziale lineare del secondo ordine

$$a_0(x)\frac{d^2u(x)}{d^2x} + a_1(x)\frac{du(x)}{dx} + a_2(x)u(x) - \sigma u(x) = f(x). \tag{A.1}$$

dove σ è un parametro complesso e in generale $a < x < b$, questa si può sempre porre nella forma (se $a_0 \neq 0$)

$$-\frac{1}{w(x)}\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{du(x)}{dx}\right] + q(x)u(x) - \sigma u(x) = f(x). \tag{A.2}$$

scegliendo

$$q(x) = a_2(x). \tag{A.3}$$

$$p(x) = exp\left[\int^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)}dt\right]. \tag{A.4}$$

$$w(x) = -\frac{p(x)}{a_0(x)}. \tag{A.5}$$

oppure in notazione operatoriale

$$(L - \sigma)u = f. \tag{A.6}$$

avendo posto

$$L = -\frac{1}{w(x)}\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right] + q(x). \tag{A.7}$$

Se l'intervallo (a, b) non è finito il problema viene classificato come un problema di Sturm Liouville del terzo tipo o singolare. Preso uno spazio di Hilbert $L_2(a, b)$ con il prodotto interno definito come

$$\langle u, v\rangle = \int_a^b u(x)v^*(x)w(x)dx. \tag{A.8}$$

$\forall u, v \in L_2(a,b)$, si ha che

$$\begin{aligned}
\langle Lu, v\rangle &= \int_a^b \left\{ -\frac{1}{w(x)}\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{du(x)}{dx}\right] + q(x)u(x)\right\} v^*(x)w(x)dx \\
&= \int_a^b u(x)\left\{ -\frac{1}{w(x)}\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{dv^*(x)}{dx} + q(x)v^*(x)\right] w(x)dx\right\} \\
&- \left\{ p(x)\left[v^*(x)\frac{du(x)}{dx} - u(x)\frac{dv^*(x)}{dx}\right]\right\}_a^b \\
&= \langle u, Lv\rangle + J(u,v)|_a^b. \qquad \text{(A.9)}
\end{aligned}$$

dove $J(u,v) = -p\left(\frac{du(x)}{dx}v^*(x) - u(x)\frac{dv^*(x)}{dx}\right)$. Se accade $J(u,v)|_a^b = 0$ allora l'operatore L è detto autoaggiunto (cosa che in definitiva dipende dalle condizione sui bordi del dominio per le funzioni u e v). Dato inoltre un operatore di Sturm-Liouville, si definisce per esso la funzione di Green come quella funzione che soddisfa l'equazione

$$(L-\sigma)g(x,\xi) = \frac{\delta(x-\xi)}{w(x)}.^1 \qquad \text{(A.10)}$$

con l'usuale significato dei simboli.

A.2 Rappresentazione spettrale

Supponiamo ora di aver risolto il problema agli autovalori del generico operatore L autoaggiunto, ovvero di conoscere le autofunzioni (e relativi autovalori) del problema seguente

$$Lu_n = \sigma_n u_n. \qquad \text{(A.11)}$$

Se ora formiamo il seguente prodotto

$$\langle (L-\sigma)u, u_n\rangle = \langle u, (L-\sigma^*)u_n\rangle. \qquad \text{(A.12)}$$

inserendovi la A.6 otteniamo

$$\langle f, u_n\rangle = \langle u, (\sigma_n - \sigma^*)u_n\rangle = (\sigma_n - \sigma)\langle u, u_n\rangle. \qquad \text{(A.13)}$$

Ma poichè è noto che una generica soluzione si può esprimere in termini si autofunzioni come

$$u(x) = \sum_n c_n u_n(x). \qquad \text{(A.14)}$$

si può dunque scrivere

$$u(x) = \sum_n \frac{\langle f, u_n\rangle}{\sigma_n - \sigma} u_n. \qquad \text{(A.15)}$$

[1] Questa definizione generalizza quella data nel capitolo 1

che rappresenta la soluzione del problema di Sturm-Liouville in termini di autofunzioni e autovalori. Continuando ancora a pensare lo spettro degli autovalori come discreto, la A.15 può essere vista come una funzione (complessa) del parametro σ e si può andare ad analizzare l'integrale

$$\oint_{C_R} u(x,\sigma)d\sigma. \tag{A.16}$$

su di un cerchio C_R di raggio R centrato nell'origine del piano complesso. Ciò produce

$$\oint_{C_R} u(x,\sigma)d\sigma = -\sum_n \langle f, u_n\rangle u_n \oint_{C_R} \frac{d\sigma}{\sigma-\sigma_n}. \tag{A.17}$$

Nella A.17 l'integrando ha n poli semplici (reali poichè L è autoaggiunto per ipotesi) e se effettuiamo il limite per R che va all'infinito possiamo applicare il teorema dei residui che fornisce

$$\begin{aligned} \lim_{R\to+\infty}\oint_{C_R} u(x,\sigma)d\sigma &= -2\pi i\sum_n \langle f, u_n\rangle u_n \\ &= -2\pi i f(x) \end{aligned} \tag{A.18}$$

poichè a secondo membro compare proprio l'espansione di Fourier del termine forzante $f(x)$. Se adesso poniamo

$$f(x) = \frac{\delta(x-\xi)}{w(x)}. \tag{A.19}$$

allora la $u(x,\sigma)$ coincide con la funzione di Green $g(x,\xi,\sigma)$, ovvero si ottiene quella che è nota come la rappresentazione spettrale [89] della funzione delta di Dirac per l'operatore L:

$$\frac{1}{2\pi i}\oint g(x,\xi,\sigma)d\sigma = -\frac{\delta(x-\xi)}{w(x)}. \tag{A.20}$$

Nella prossima sezione applicheremo questo risultato all'equazione di Bessel.

A.2.1 L'equazione di Bessel

Considerando ora l'equazione di Bessel di ordine n

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \frac{1}{x}\frac{du(x)}{dx} + \left(\frac{n^2}{x^2} - \sigma\right)u(x) = f(x). \tag{A.21}$$

possiamo porla nella forma A.2 scegliendo

$$\begin{aligned} q(x) &= \frac{n^2}{x^2} \\ p(x) &= x \\ w(x) &= x \end{aligned} \tag{A.22}$$

Limitiamoci ora al caso $n = 0$. In tal caso l'operatore di Sturm-Liouville A.7 diviene

$$L = -\frac{1}{x}\left[\frac{d}{dx}\left(x\frac{d}{dx}\right)\right]. \tag{A.23}$$

e considerando il dominio dell'operatore pari all'intervallo $(0, \infty)$ e le condizioni al contorno

$$\lim_{x\to+\infty} u(x) = 0 \tag{A.24}$$

$$\lim_{x\to 0} u(x) < \infty \tag{A.25}$$

si può verificare che esso è autoaggiunto. A questo punto cerchiamo la rappresentazione spettrale per l'operatore L in questo caso. La prima cosa da fare è trovare la funzione di Green, che si può mostrare essere pari a

$$g(x,\xi) = \frac{\pi}{2i}\begin{cases} H_0^{(2)}(\sqrt{\sigma}\xi)J_0(\sqrt{\sigma}x), x < \xi \\ H_0^{(2)}(\sqrt{\sigma}x)J_0(\sqrt{\sigma}\xi), x > \xi \end{cases} \tag{A.26}$$

dove $H_0^{(2)}$ è la funzione di Hankel del secondo tipo e

$$Im\sqrt{\sigma} < 0 \tag{A.27}$$

Per assicurare la condizione A.27 si restringe σ come segue

$$\sigma = |\sigma|\, e^{i\varphi}, \quad -2\pi < \varphi < 0. \tag{A.28}$$

di modo che risulti

$$\sqrt{\sigma} = |\sigma|^{-1/2}\, e^{i\varphi/2}, \quad -\pi < \frac{\varphi}{2} < 0. \tag{A.29}$$

Si può verificare che questa definizione produce un *branch cut* nella funzione $g(x,\xi,\sigma)$ lungo l'asse reale positivo nel piano σ. Infatti, limitandoci ad analizzare il caso $x > \xi$, si ha:

$$\lim_{\varphi\to-2\pi} H_0^{(2)}(\sqrt{\sigma}x)J_0(\sqrt{\sigma}\xi) = -H_0^{(1)}(|\sigma|^{1/2}\, x)J_0(|\sigma|^{1/2}\, \xi) \tag{A.30}$$

$$\lim_{\varphi\to 0} H_0^{(2)}(\sqrt{\sigma}x)J_0(\sqrt{\sigma}\xi) = H_0^{(2)}(|\sigma|^{1/2}\, x)J_0(|\sigma|^{1/2}\, \xi) \tag{A.31}$$

dove si è fatto uso delle relazioni

$$J_0(e^{-i\pi}\, |\sigma|^{1/2}\, \xi) = J_0(|\sigma|^{1/2}\, \xi) \tag{A.32}$$

$$H_0^{(2)}(e^{-i\pi}\, |\sigma|^{1/2}\, x) = -H_0^{(1)}(|\sigma|^{1/2}\, x) \tag{A.33}$$

con $H_0^{(1)}$ funzione di Hankel del primo tipo di ordine zero. Dunque la funzione di Green effettua un salto nell'attraversare l'asse reale positivo. Tenendo

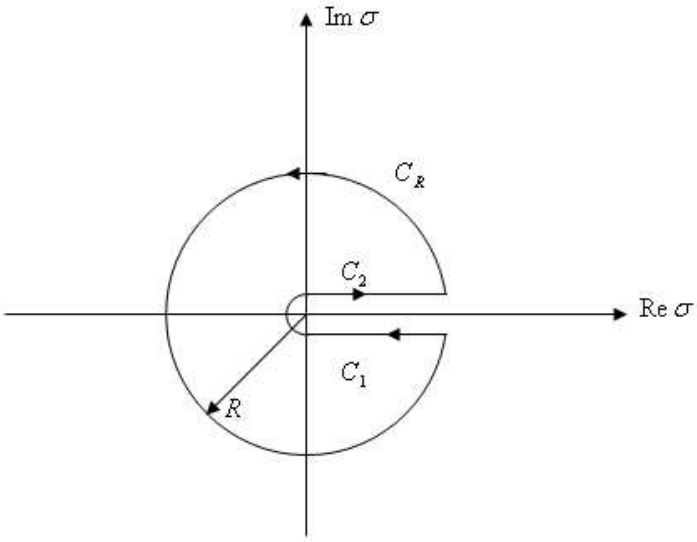

Figura A.1: Cammino di integrazione scelto per valutare la rappresentazione spettrale della delta di Dirac per l'equazione di Bessel A.21.

conto di questo, se scegliamo il cammino di integrazione come in figura A.1 deve risultare

$$\oint_{C_R+C_1+C_2} g(x,\xi,\sigma)d\sigma = 0. \tag{A.34}$$

poichè la funzione di Green non possiede poli all'interno del dominio di integrazione. Passando al limite per $R \to \infty$ e contemporaneamente nell'ipotesi che il raggio ρ del semicircoletto che circonda l'origine vada a zero risulta

$$\lim_{R\to+\infty}\lim_{\rho\to 0}\oint_{C_R} g(x,\xi,\sigma)d\sigma = -2\pi i\frac{\delta(x-\xi)}{w(x)}. \tag{A.35}$$

e

$$\lim_{R\to+\infty}\lim_{\rho\to 0}\oint_{C_1+C_2} g(x,\xi,\sigma)d\sigma = -\frac{\pi}{i}\int_0^\infty J_0(|\sigma|^{1/2}x)J_0(|\sigma|^{1/2}\xi)d\sigma. \tag{A.36}$$

In definitiva si ottiene

$$\frac{\delta(x-\xi)}{x} = \frac{1}{2}\int_0^\infty J_0(|\sigma|^{1/2}x)J_0(|\sigma|^{1/2}\xi)d\sigma. \tag{A.37}$$

oppure, con il cambio di variabile $\beta = |\sigma|^{1/2}$:

$$\frac{\delta(x-\xi)}{x} = \int_0^\infty J_0(\beta x)J_0(\beta\xi)\beta d\beta. \tag{A.38}$$

che è la rappresentazione cercata. A causa della simmetria del nucleo integrale rispetto alle variabili x e ξ la A.38 è valida anche per $x > \xi$. La

A.38 conduce alla definizione della trasformata di Fourier-Bessel nel seguente modo. Consideriamo lo spazio di Hilbert $L_2(0,\infty)$ con il prodotto interno definito come

$$\langle u(x), v(x)\rangle = \int_0^\infty u(x)v(x)xdx. \tag{A.39}$$

Ogni funzione $u(x)$ appartenente allo spazio si può decomporre come

$$u(x) = \int_0^\infty u(\xi)\frac{\delta(x-\xi)}{x}\xi d\xi. \tag{A.40}$$

e sostituendo qui la forma spettrale per la $\delta(x-\xi)$, si ottiene

$$u(x) = \int_{\xi=0}^\infty \int_{\beta=0}^\infty u(\xi)J_0(\beta x)J_0(\beta\xi)\beta d\beta\xi d\xi. \tag{A.41}$$

Può di conseguenza essere definita la seguente coppia di trasformate

$$U(\beta) = \int_0^\infty u(x)J_0(\beta x)xdx \tag{A.42}$$

$$u(x) = \int_0^\infty U(\beta)J_0(\beta x)\beta d\beta \tag{A.43}$$

che non rappresentano altro che la trasformata di Fourier-Bessel che si incontra, per esempio, nello studio della propagazione parassiale di campi luminosi a simmetria radiale (vedi sezione 1.2.2). Alla luce delle definizioni appena date possiamo dire che l'integrale 1.41, che descrive la propagazione in regime di Fresnel di un campo ottico a simmetria radiale, si può riscrivere come:

$$U(r,\theta,z) = -\frac{ike^{ikz}}{z}e^{i\frac{k}{2z}r^2}FB\left\{U_0(\rho)e^{i\frac{k\rho^2}{2z}}\right\}. \tag{A.44}$$

dove $FB\{\cdot\}$ rappresenta la trasformata di Fourier-Bessel di variabile $\beta = kr/z$. Un'ultima interessante osservazione è la seguente. Abbiamo visto che alla funzione di partenza $u(x)$ corrisponde, nel dominio trasformato, la funzione $U(\beta)$; si può altresì osservare che alla funzione $Lu(x)$, ottenuta applicando l'operatore di Sturm-Liouville A.23 ad una funzione dello spazio di Hilbert, corrisponde la funzione trasformata $\beta^2U(\beta)$. Ovvero se accade

$$u(x) \Leftrightarrow U(\beta). \tag{A.45}$$

allora si ha anche

$$Lu(x) = -\frac{1}{x}\left[\frac{d}{dx}(x\frac{du}{dx})\right] \Leftrightarrow \beta^2U(\beta). \tag{A.46}$$

Qundi l'azione dell'operatore differenziale L, nel dominio di partenza, si traduce in una semplice operazione algebrica (moltiplicazione) nel dominio trasformato.

Appendice B

Teorema di Noether

Il teorema di Noether, valido per campi scalari reali e per una trasformazione di simmetria che comprenda anche una parte di simmetrie interne, si può enunciare come segue:

> **Teorema di Noether**:*Se una teoria di campo con tensore energia-momento $T^{\mu\nu}$ ammette una famiglia di trasformazioni di simmetria ad un parametro $(f_\varepsilon)_{\varepsilon\in\Re}$ (che ammetteremo essere una famiglia di diffeomorfismi), allora la corrente*
>
> $$J^\mu = v^\nu T^\mu_\nu + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \frac{d\Phi^\varepsilon(f_\varepsilon(x))}{d\varepsilon}_{|\varepsilon=0}. \tag{B.1}$$
>
> *è conservata. Nella B.1 si è indicato con v^ν le componenti del campo vettoriale caratteristico, generatore della trasformazione agente solo sulle variabili spaziali, e con Φ^ε la nuova configurazione di campo ottenuta mediante la parte interna della trasformazione di simmetria.*[35]-[36]-[38]

Dimostrazione
Consideriamo il funzionale *azione*

$$S_{f_\varepsilon(\Omega)}(\Phi) = \int_\Omega L_D(\Phi)\sqrt{g(y)}d^n y. \tag{B.2}$$

dove Ω è il dominio di integrazione e $\sqrt{g}d^n y$ l'elemento di volume. A seguito della trasformazione anche la densità di Lagrangiana risulta modificata. Dovrà però risultare

$$\frac{dS(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{d}{d\varepsilon}\int_{f_\varepsilon(\Omega)} L_D\left[\Phi^\varepsilon(y), \frac{\partial\Phi^\varepsilon(y)}{\partial y^\mu}, g_{\alpha\beta}\right]\sqrt{g(y)}d^n y = 0. \tag{B.3}$$

Nella B.3 si vede che anche il dominio di integrazione dipende da ε, cosa che complica la valutazione dell'integrale. Tuttavia se effettuiamo la trasformazione di coordinate $y = f_\varepsilon(x)$, il dominio diventerà indipendente da ε; questo

è possibile poichè, per ipotesi, f_ε è un diffeomorfismo. Si ottiene quindi

$$S_{f_\varepsilon(\Omega)}(\Phi) = \int_U L_D \left[\Phi^\varepsilon(y(x)), \frac{\partial x^\nu}{\partial y^\mu}\frac{\partial \Phi^\varepsilon(y)}{\partial x^\nu}, g_{\alpha\beta}\right] \sqrt{g(y(x))}\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right| d^n x \quad \text{(B.4)}$$

dove $U \subset \Re^n$ è il dominio indipendente da ε. Effettuando la differenziazione, la B.3 diviene

$$\begin{aligned}\frac{dS(\varepsilon)}{d\varepsilon}_{|\varepsilon=0} &= \int_U \left[\frac{\partial L_D}{\partial \Phi}\frac{\partial \Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{\partial x^\nu}{\partial y^\mu}\frac{\partial \Phi^\varepsilon(y(x))}{\partial x^\nu}\right) + \frac{\partial L_D}{\partial g_{\alpha\beta}}\frac{dg_{\alpha\beta}}{d\varepsilon}\right]\sqrt{g(x)}d^n x \\ &+ \int_U L_D\left[\frac{d\sqrt{g(y(x))}}{d\varepsilon} + \sqrt{g(x)}\frac{d}{d\varepsilon}\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right|\right] d^n x = 0 \end{aligned} \quad \text{(B.5)}$$

Si può mostrare che la derivata dello Jacobiano $\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right|$ può legarsi alle componenti del campo vettore caratteristico v^ν come segue

$$\frac{d}{d\varepsilon}\left|\frac{\partial y}{\partial x}\right| = \frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{\partial y^\mu}{\partial x^\nu}\right) = \partial_\mu v^\mu. \quad \text{(B.6)}$$

e quindi la B.5 si può riscrivere come

$$\begin{aligned}\frac{dS(\varepsilon)}{d\varepsilon}_{|\varepsilon=0} &= \int_U [\frac{\partial L_D}{\partial \Phi}\frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi))}\partial_\mu \frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi))} - \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\partial_\nu \Phi \partial_\mu a^\nu \\ &+ \frac{\partial L_D}{\partial g_{\alpha\beta}}\frac{dg_{\alpha\beta}}{d\varepsilon}]\sqrt{g(x)}d^n x \\ &+ \int_U L_D[\partial_\mu \sqrt{g(x)}a^\nu + \sqrt{g(x)}\partial_\mu a^\mu]d^n x. \end{aligned} \quad \text{(B.7)}$$

Nella B.7 si possono individuare due gruppi di termini A e B tali che l'integrale B.7 si possa scrivere come

$$\int_U (A+B)\sqrt{g}d^n x. \quad \text{(B.8)}$$

Infatti per il gruppo A si ottiene[1]

$$\begin{aligned} A &= \frac{\partial L_D}{\partial \Phi}\frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + \frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\partial_\mu \frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} \\ &= \frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu\left(\sqrt{g}\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon}\right) \end{aligned} \quad \text{(B.9)}$$

mentre per il gruppo B

$$\begin{aligned} B &= -\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\partial_\nu \Phi \partial_\mu v^\nu + L\partial_\mu v^\mu + L - D\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu(\sqrt{g})v^\nu + \frac{\partial L_D}{\partial g_{\alpha\beta}}(\partial g_{\alpha\beta})v^\nu \\ &= \partial_\mu v^\mu\left[-\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\partial_\nu \Phi + \delta^\mu_\nu L_D\right] + v^\nu\left[L_D\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\nu(\sqrt{g}) + \frac{\partial L_D}{\partial g_{\alpha\beta}}\partial_\nu g_{\alpha\beta}\right] \end{aligned} \quad \text{(B.10)}$$

[1] Si fa uso delle equazioni di Eulero-Lagrange covarianti $\frac{\partial L_D}{\partial \Phi} = \frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu\left(\sqrt{g}\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)}\right)$

Poichè vale la seguente identità

$$L_D \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\nu(\sqrt{g}) + \frac{\partial L_D}{\partial g_{\alpha\beta}} \partial_\nu g_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu(\sqrt{g} T^\mu_\nu). \tag{B.11}$$

la B.10 si riscrive come

$$B = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu(\sqrt{g} T^\mu_\nu v^\nu). \tag{B.12}$$

In questo modo i termini A e B sono stati scritti come delle divergenze e danno

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \int_U \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu \left(\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + v^\nu T^\mu_\nu \right) \right] \sqrt{g} d^n x = 0. \tag{B.13}$$

Poichè il dominio di integrazione U è arbitrario, la B.13 implica

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu \left(\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + v^\nu T^\mu_\nu \right) = 0. \tag{B.14}$$

ovvero che la corrente

$$\left(\frac{\partial L_D}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \frac{d\Phi^\varepsilon}{d\varepsilon} + v^\nu T^\mu_\nu \right). \tag{B.15}$$

è conservata, che è appunto quanto dovevamo dimostrare.

Pubblicazioni

Di seguito si riportano i lavori prodotti nell'ambito della ricerca di dottorato svolta.

- **O. El Gawhary**, S. Severini, "Lorentz beams and symmetry properties in paraxial optics," *J. Opt A: Pure Appl. Opt.*, **8**, 409-414, (2006)
- **O. El Gawhary**, S. Severini, "Lorentz beams as a basis for a new class of rectangularly symmetric optical fields" *Opt. Comm.*, **269**, 274-284 (doi:10.1016/j.optcom.2006.08.007), (2007).
- **O. El Gawhary**, S. Severini, "Lagrangian description of paraxial wave optics and derivation of conserved current and charge for the scale-invariance symmetry", sottoposto a pubblicazione su *J. Opt. Soc. Am. A* .
- L. G. Quagliano, **O. El Gawhary**, J. R. Lombardi, "SERS spectroscopy for studying biological molecules adsorbed on semiconductor quantum dots", in preparazione.

Bibliografia

[1] E. Tonti, *On the geometrical structure of electromagnetism.* In: Gravitation, Electromagnetism and Geometrical Structures, G. Ferrarese ed., Pitagora, Bologna (1996).

[2] C. Mattiussi, *The finite volume, finite element, and finite difference methods as numerical methods for physical field problems*, Advances in Imaging and Electron Physics, **113**, (2000)

[3] J. H. Richmond, *IEEE Trans. on Microwave Theory Tech.*, **MTT-13**, 408-412, (1965).

[4] J. H. Richmond, *IEEE Trans. on Antennas and Propagation* , **AP-14**, 782-786, (1966).

[5] F. Gori, *Elementi di ottica*, Accademica, (1997).

[6] C. Bernardini, O. Ragnisco, P. M. Santini, *Metodi matematici della fisica*, La Nuova Italia Scientifica, (1993).

[7] L. Novotny, M. R. Beversluis, K. S. Youngworth, T. G. Brown, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 5251-5254, (2001).

[8] D. Ganic, X. Gan, and M. Gu, *Opt. Express*,**11**, 2747-2752, (2003)

[9] D. Ganic, X. Gan, M. Gu, *Opt. Express*,**12**, 2670-2675, (2004)

[10] D. Ganic, X. Gan, and M. Gu, *Opt. Express*,**13**, 1260-1265, (2005)

[11] L. Novotny, E. J. Sánchez, X. S. Xieet, *Ultramicroscopy*, **71** , 21-29, (1998).

[12] R. Simon, E.C.G. Sudarshan, N.Mukunda *J. Opt. Soc. Am. A* , **3**, 536-540, (1985).

[13] G. Gerosa, P. Lampariello, 1995 *Lezioni di Campi Elettromagnetici*, (Roma Edizioni Ingegneria 2000)

[14] J. J. Sakurai, *Meccanica Quantistica Moderna*, Zanichelli, (1994)

[15] Ju. V. Novozilov and Ju. A. Jappa, *Elettrodinamica*, Mosca Edizioni Mir, (1987)

[16] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics*, Cambridge University Press, seventh (expanded) edition, (2001)

[17] O. Svelto, *Principles of Lasers*, Polytechnic Institute of Milan and National Research Council, Milan Italy, Springer (1998).

[18] S. C. Tidwell, D. H. Ford and W. D. Kimura,*Appl. Opt.*, **29**, 2234-2239, (1990).

[19] R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 2339011-2339014, (2003)

[20] F. Gori, *J. Opt. Soc. Am. A* , **18**, 1579-1587, (2001).

[21] R. Borghi, M. Santarsiero, *J. Opt. Soc. Am. A* , **21**, 2029-2037, (2004).

[22] M. Lax, W. H. Louisell and W. B. McKnight, *Phys. Rev. A*, **11** n° 4, (1975).

[23] A. Wünsche, *J. Opt. Soc. Am. A* , **9**, 765-774, (1992).

[24] S. R. Seshadri, *J. Opt. Soc. Am. A* , **19**, 2134-2141, (2002).

[25] J. Durnin, J.J. Miceli and H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1499, (1987).

[26] Sheppard CJR and Wilson T., *IEE J. Microwaves, Optics and Acoustic*, **2**, 105-112, (1978).

[27] F. Gori, G. Guattari and C. Padovani, *Opt. Commun.*, **64**, 491-495, (1987).

[28] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *A course of modern analysis*, Cambridge University Press, (1927).

[29] J. C. Gutiérrez-Vega, M. D. Iturbe-Castillo, and S. Chávez-Cerda, *Opt. Lett.*, **25**, 20, (2000).

[30] J. C. Gutiérrez-Vega, M. D. Iturbe-Castillo, G. A. Ramirez, E. Tepichin, R. M. Rodriguez-Dagnino, S. Chavez-Cerda, G. H. New, *Opt. Comm.*, **195**, 35-40, (2001).

[31] M. A. Bandres, J. C. Gutierrez-Vega, S. Chavez-Cerda, *Opt. Lett.*, **29**, 1, (2004).

[32] I. S. Gradshteyn, Tyzhik, *Tables of integrals, series and product*, Academic Press New York, (1980).

[33] W. L. Burke, *Applied differential geometry*, Cambridge University Press, (1985).

[34] C. W. Misner, K. S. Thorne, J. A. Wheeler, *Gravitation*, W. H. Freeman & Company, San Francisco, (1973).

[35] B. Felsager, *Geometry, Particles and Fields*, Springer, (1998).

[36] P. Olver, *Applications of Lie Groups to differential equations*, 2nd edition, Springer-Verlag New York, (1993)

[37] R. Borghi, M. Santarsiero, R. Simon, *J. Opt. Soc. Am. A*, **21**, 4, (2004).

[38] P. Olver, *Equivalence, Invariants and Symmetry*, Cambridge Univarsity Press, (1995).

[39] A. Wünsche, *J. Opt. Soc. Am. A*, **8**, 1320-1329, (1989).

[40] R. Simon, N. Mukunda, *J. Opt. Soc. Am. A*, **15**, 2146-2155, (1998).

[41] A. Yariv, *Optical Electronics*, Oxford University Press, fourth ed., intern. ed., (1991).

[42] O. El Gawhary and S. Severini, *J. Opt A: Pure Appl. Opt.*, **8**, 409-414, (2006)

[43] A. P. Kiselev, *Opt. Spectrosc.*, **96**, 479-481, (2004).

[44] J.C. Gutierrez-Vega and M.A. Bandres, *J. Opt. Soc. Am. A*, **22**, 289-298, (2005).

[45] R. K. Luneburg, *Mathematical theory of Optics*, California University Press, Berkeley, (1964).

[46] H. A. Buchdahl, *An introduction to Hamiltonian Optics*, Cambridge University Press, Cambridge, (1970).

[47] V. Lakshminarayanan, A. K. Ghatak, K. Thyagarajan, *Lagrangian Optics*, Kluwer, Boston, (2002).

[48] L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, J. P. Woerdman, *Phys. Rev A*, **45**, 11, 8185-8189, (1992).

[49] L. Allen, M. J. Padgett, *Opt. Comm.*, **184**, 67-71, (2000).

[50] M. Padgett, S. M. Barnett, R. Loudon, *J. Mod. Opt.*, **50** N° 10, 1555-1562, (2003).

[51] L. Allen, M. J. Padgett, M. Babiker, *The orbital angular momentum of light*, in Progress in Optics XXXIX, edited by E. Wolf (Elsevier Science B. V., New York), 291-372, (1999).

[52] L. Allen, S. M. Barnett, M. J. Padgett, *Optical Angular Momentum*, Institute of Physics Publishing, London, (2003).

[53] J. Serna, *Angular Momentum in optical beams*, in Free and Guided Optical Beams, edited by S. Martellucci and M. Santarsiero, World Scientific Publishing, (2002).

[54] F. Gori, M. Santarsiero, R. Borghi, G. Guattari, *Eur. J. Phys.*, **19**, 439-444, (1998).

[55] R. Borghi, G. Guattari, L. de la Torre F. Gori, M. Santarsiero, *J. Opt. Soc. Am. A*, **20**, 9, 1763-1770, (2003).

[56] K. A. Nugent, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2261-2264, (1993).

[57] F. Gori, M. Santarsiero, G. Guattari, *J. Opt. Soc. Am. A*, **10**, 673-679, (1993).

[58] T. E. Gureyev, A. Roberts, K. A. Nugent, *J. Opt. Soc. Am. A*, **12**, 1942-1946, (1995).

[59] G. Gbur, E. Wolf, *Opt. Lett.*, **27**, 1880-1892, (2002).

[60] M. R. Teague, *J. Opt. Soc. Am. A*, **73**, 1434-1441, (1983).

[61] J. Tu, S. Tamura, *J. Opt. Soc. Am. A*, **15**, 202-206, (1998).

[62] A. S. Sedra, K. C. Smith, *Microelectronic Circuits*, Saunders College Publishing, third ed., (1991)

[63] J. M., A. Grabel, *Microelettronica*, McGraw-Hill, sec. ed., (1994).

[64] L. Franchina, P. Marietti, *Sistemi elettronici a banda frazionale larga*, Masson, (1995).

[65] W.P.Dumke, *IEEE J. Quantum Electron.* , **QE-11 7**, 400-402, (1975).

[66] A. Naqwi and F. Durst, *Appl.Opt*, **29**, 1780-1785, (1990).

[67] M. Abramowitz and I.A. Stegun,*Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1965

[68] O. El Gawhary, S. Severini, *Opt. Comm.*, in pubblicazione, doi: 10.1016/j.optcom.2006.08.007, (2006).

[69] M. A. Bandres, J. C. Gutierrez-Vega, *J. Opt. Soc. Am. A*, **21**, 5, (2003).

[70] M. A. Bandres, J. C. Gutierrez-Vega, *Opt. Lett.*, **29**, 2, (2004).

[71] Theodore W. Gamelin, *Complex Analysis*, Springer, New York, (2003)

[72] R. Courant and D. Hilbert, *Methods of mathematical physics*, Volume I, John Wiley & Sons, (1989)

[73] A. Papoulis, *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*, McGraw-Hill Inter. Ed., (1991).

[74] S. Barbarossa, T. Bucciarelli, *Lezioni di Teoria dei Segnali*, Ed. Ingengeria 2000, (1993).

[75] E. Onofri and C. Destri, *Istituzioni di Fisica Teorica*, Carocci Ed., first repr. (1998)

[76] F. Gori,*J. Opt. Soc. Am. A* **18**, 1612-1617 (2001).

[77] P. Hendra, C. Jones, G. Warnes, *Fourier trasform Raman spectroscopy - Instrumentation and Chemical Applications*, Ellis Horwood series in Annalytical Chemistry.

[78] M. Delhaye, J. Barbillat, J. Aubard, M. Bridoux, E Da Silva, *Instrumentation* in Raman microscopy, Developments and applications, edited by G.Turrell & J. Corset,Academic Press, London, (1996).

[79] M. Fleischmann, P. J. Hendra, A. J. McQuillan, *Chem. Phys. Lett.*, **26**, 123, (1974).

[80] L. G. Quagliano, *Surface enhanced Raman scattering (SERS) effect on semiconductor materials*, in Recent Res. Devel. Spectroscopy, Transworld Research Network, (2002).

[81] B. Giese, D. McNaughton, *J. Phys. Chem. B.*, **106**, 101-112, (2002).

[82] H. Watanabe, Y. Ishida, N. Hayazawa, Y. Inouye, S. Kawata, *Phys. Rev. B.*, **69**, 155418, (2004).

[83] R. Santamaria, E. Charro, A. Zacarias, M. Castro, *J. Comput. Chem.*, **20**, 511, (1999).

[84] H. J. Novak, L. Lapinski, J. S. Kwiatkowski, J. Leszczynski, *J. Phys. Chem.*, **100**, 3527, (1996).

[85] L. G. Quagliano, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 7393-7398, 2004

[86] J. D. Jackson, *Classical Electrodinamics*, Wiley, New York, (1962).

[87] C. Mencuccini, V. Silvestrini, *Fisica II - Elettromagnetismo - Ottica*, Liguore Editore, Napoli, (1998).

[88] E. Amaldi, R. Bizzarri, G. Pizzella, *Fisica Generale*, Zanichelli Editore, Bologna, (1991).

[89] D. G. Dudley, *Mathematical foundations for electromagnetic theory*, IEEE Press, New York, (1994).

Elenco delle figure

1.1 Piano sorgente e piano di ricostruzione 5

3.1 Varietà, spazio tangente e curva integrale 22

4.1 Tipico diodo laser a giunzione 50

4.2 Profilo di intensità (misurato) di un fascio prodotto da un diodo laser collimato 51

4.3 Modulo del fascio di Lorentz valutato su: a) piano sorgente $z = 0$ b) $z = 0.1z_R$ c) $z = 0.5z_R$ d) $z = z_R$ e) $z = 1.5z_R$ f) $z = 2z_R$. I parametri del campo sono scelti come segue: $\lambda = 0.6328\mu m$, $w_x = w_y = w = 10^3\lambda$. $z_R = 2\pi w^2/\lambda = 3.976m$ [42] 55

4.4 Ampiezza del campo (linea continua) e intensità (linea tratteggiata) per il primo (a) e secondo (b) campo super-Lorentziano corrispondenti a $M = 1$. Si è scelto $\alpha = 1$. L'ascissa è in unità adimensionali normalizzata al valore di α. 67

4.5 La famiglia di quattro campi super-Lorentziani ortogonali ottenuta per $M = 2$. Si riporta l'ampiezza del campo (linea tratteggiata) e l'intensità (linea continua) su $z = 0$. I parametri sono stati fissati come segue: $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 2$. L'ascissa è in unità adimensionali normalizzata al valore di α_1. 68

4.6 Modulo del fascio $SLB_0(x, z)$ graficato per i seguenti valori: $\lambda = 6 \cdot 10^{-7}$ [m], $\alpha_1 = 10^3\lambda$, $\alpha_2 = 2\alpha_1$. le variabili x e z sono espresse in metri. La variabile z è compresa nell'intervallo $[z_{R_1}, z_{R_2}]$ con $z_{R_1} = 3.7m$ e, $z_{R_2} = 15m$. 69

4.7 Modulo del campo $SLB_2(x, z)$. I valori dei parametri sono fissati come in figura 4.6 70

4.8 Il fascio Gaussiano fondamentale e^{-x^2/w_0^2}, rappresentato mediante un fascio super-Lorentziano come indicato nella formula 4.92 (a) e errore relativo (b). I grafici sono effettuati su $z = 0$. $w_0 = 100\mu m$. L'ascissa è in metri. 72

4.9 Propagazione di un fascio super-Lorentziano di ordine $M = 5$, descrivente il fascio Gaussiano e^{-x^2/w_0^2}, con $w_0 = 100\mu m$. Le simulazioni sono fatte per $\lambda = 0.6328\mu m$. I valori di x e z sono in metri. 73
4.10 Andamento del modulo, in unità arbitrarie, del fascio di Hermite-Gauss HG_{20} (lato sinistro) e la sua descrizione approssimata mediante un fascio super-Lorentziano di ordine $M = 5$ (lato destro). I grafici sono stati realizzati per $z_1 = 0$, $z_2 = 0.5\, z_R$, $z_3 = z_R$, dove z_R è la distanza di Rayleigh del fascio di Hermite-Gauss. I parametri sono stati scelti come segue: $\lambda = 0.6328\mu m$, $w_0 = 100\mu m$ e M=5. Le coordinate spaziali (x, y) sono normalizzate al valore w_0 e vanno da $[-5, 5] \times [-5, 5]$. 74

5.1 Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso radiale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = 0$, $w_0 = 100\mu m$. 79
5.2 Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso azimutale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = \pi/2$, $w_0 = 100\mu m$. . 80
5.3 Linee di campo per polarizzazione a simmetria ellittica nel piano $z = 0$: caso a spirale. In riferimento all'equazione 5.8 si ha $f(r, z) = J_0(r, z)$, $A/B = 3/10$, $\alpha = 0.8$, $w_0 = 100\mu m$. . . . 81

6.1 Un diagramma di livelli di energia semplificato che spiega l'origine delle righe Stokes e anti-Stokes in una molecola. . . . 86
6.2 Schema di una configurazione di acquisizione Raman in *back-scattering*. 89
6.3 Schema di funzionamento di un singolo monocromatore. . . . 90
6.4 Vista latero-anteriore del microspettrometro Raman in dotazione presso il laboratorio microRaman dell'Istituto Studi Materiali Nanostrutturati (ISMN) del CNR, Montelibretti, Roma. 94
6.5 Vista latero-posteriore del microspettrometro Raman in dotazione presso il laboratorio microRaman dell'Istituto Studi Materiali Nanostrutturati (ISMN) del CNR, Montelibretti, Roma. 95
6.6 Immagine al microscopio elettronico di un campione di `GaAs` con deposito di isole di `Ag`. 97
6.7 Struttura chimica dell'adenina 97
6.8 Struttura chimica della tirosina 98
6.9 Spettro dell'adenina liquida, eccitata da sorgente a $514.5nm$, contenuta in capillare di vetro. Intervallo $[200, 1000]$ cm^{-1}. . . 99
6.10 Spettro dell'adenina liquida, eccitata da sorgente a $514.5nm$, contenuta in capillare di vetro. Intervallo $[800, 1200]$ cm^{-1}. . 99

6.11 Spettro del capillare in vetro, diametro $1mm$, utilizzato per contenere le molecole in soluzione acquosa. Intervallo $[300, 2900]cm^{-1}$.100
6.12 Spettro di `GaAs` cristallino con isole di `Ag`. Intervallo $[300, 1200]cm^{-1}$.100
6.13 Spettro di `GaAs` cristallino con isole di `Ag`. Intervallo $[800, 2500]cm^{-1}$.101
6.14 Isole di `Ag`, accresciute su strato di `GaAs`, e adsorbimento di molecole in superficie. 102
6.15 Spettro del `GaAs` con isole di argento dopo adsorbimento di molecole di adenina. Intervallo $[300, 1200]cm^{-1}$. 102
6.16 Spettro del `GaAs` con isole di argento dopo adsorbimento di molecole di adenina. Intervallo $[800, 2500]cm^{-1}$ 103
6.17 Spettro della soluzione acquosa satura di tirosina. Intervallo $[200, 1000]cm^{-1}$. 104
6.18 Spettro della soluzione acquosa satura di tirosina. Intervallo $[800, 2000]cm^{-1}$. 105
6.19 Spettro Raman di campione di *quantum dots* di `InAs/GaAs`. Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$. 106
6.20 Spettro Raman di campione di *quantum dots* di `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$. 107
6.21 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs` . Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$. 107
6.22 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$. 108
6.23 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[1600, 2200]cm^{-1}$. 108
6.24 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[400, 900]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica. 109
6.25 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[900, 1600]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica. 110
6.26 Spettro della tirosina adsorbita su *quantum dots* `InAs/GaAs`. Intervallo $[1600, 2000]cm^{-1}$. Il campione è stato, dopo immersione in tirosina, abbondantemente sciacquato in `ACN`, ma non sottoposto ad agitazione ultrasonica. 111

A.1 Cammino di integrazione scelto per valutare la rappresentazione spettrale della delta di Dirac per l'equazione di Bessel A.21. 121