Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev
Lekce 1: Úvod – dielektrická odezva; časově reverzní symetrie; Kramers–Kronigovy relace; sumační pravidlo; symetrie dielektrického tenzoru

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

3. 3. 2016

Obsah

Úvod – Disperzní modely

Disperzní modely popisují spektrální závislost **lineární** dielektrické odezvy kvazineutrálního hmotného prostředí. **Dielektrická odezva** je obecný pojem vyjadřující odezvu hmotného prostředí (nabitých částic) na vnější proměnné elektromagnetické pole. Dielektrická odezva závisí na chemických i strukturálních vlastnostech materiálu. Může být reprezentována různými veličinami:

- susceptibilita: $\hat{\chi}(\omega)$ nebo $\chi(t)$ (nejpřirozeněji popisuje reakci nabitých částic na vnější harmonické pole, pulz)
- dielektrická funkce: $\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\chi}(\omega)$ (vystupuje v MR jako relativní permitivita)
- komplexní index lomu: $\hat{n}(\lambda) = n(\lambda) + \mathrm{i}k(\lambda) = \sqrt{\hat{\varepsilon}(\lambda)}$ (vystupuje v rovinné vlně, řešení VR)
- vodivost: $\sigma(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon_\mathrm{i}(\omega)$ (vhodná pro vodivé materiály)
- ztrátová funkce (loss function): $L(\omega) = -\Im\left(\hat{\varepsilon}^{-1}(\omega)\right)$ (popisuje brždění el. nabité částice)
- funkce síly přechodu (transition strength function): $F(E) = E\varepsilon_\mathrm{i}(E)$ (sumační pravidlo)
- funkce pravděpodobnosti přechodu (transition probability function, většinou označovaná jako joint density of states JDOS): $J(E) = E^2\varepsilon_\mathrm{i}(E)$

Kromě frekvence ω (energii fotonu E; vlnové délce λ) dielektrická odezva závisí i na jiných fyzikálních veličinách jako jsou teplota T, tlak p, intenzita vnějších polí $\boldsymbol{E}_\mathrm{ext}$ nebo $\boldsymbol{H}_\mathrm{ext}$, atd.

Úvod – Disperzní modely

Disperzní modely popisují spektrální závislost **lineární** dielektrické odezvy kvazineutrálního hmotného prostředí. **Dielektrická odezva** je obecný pojem vyjadřující odezvu hmotného prostředí (nabitých částic) na vnější proměnné elektromagnetické pole. Dielektrická odezva závisí na chemických i strukturálních vlastnostech materiálu. Může být reprezentována různými veličinami:

- susceptibilita: $\hat{\chi}(\omega)$ nebo $\chi(t)$ (nejpřirozeněji popisuje reakci nabitých částic na vnější harmonické pole, pulz)
- dielektrická funkce: $\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\chi}(\omega)$ (vystupuje v MR jako relativní permitivita)
- komplexní index lomu: $\hat{n}(\lambda) = n(\lambda) + \mathrm{i}k(\lambda) = \sqrt{\hat{\varepsilon}(\lambda)}$ (vystupuje v rovinné vlně, řešení VR)
- vodivost: $\sigma(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon_{\mathrm{i}}(\omega)$ (vhodná pro vodivé materiály)
- ztrátová funkce (loss function): $L(\omega) = -\Im\left(\hat{\varepsilon}^{-1}(\omega)\right)$ (popisuje brždění el. nabité částice)
- funkce síly přechodu (transition strength function): $F(E) = E\varepsilon_{\mathrm{i}}(E)$ (sumační pravidlo)
- funkce pravděpodobnosti přechodu (transition probability function, většinou označovaná jako joint density of states JDOS): $J(E) = E^2\varepsilon_{\mathrm{i}}(E)$

Ve skutečnosti dielektrická odezva může záviset i na vlnovém vektoru $\boldsymbol{k}$ (prostorová disperze) a navíc v anizotropním prostředí je dielektrická odezva popsaná tenzorem a ne skalárem a proto část zmiňovaných funkcí jsou tenzory.

Úvod – Disperzní modely

Disperzní modely popisují spektrální závislost **lineární** dielektrické odezvy kvazineutrálního hmotného prostředí. **Dielektrická odezva** je obecný pojem vyjadřující odezvu hmotného prostředí (nabitých částic) na vnější proměnné elektromagnetické pole. Dielektrická odezva závisí na chemických i strukturálních vlastnostech materiálu. Může být reprezentována různými veličinami:

- susceptibilita: $\hat{\chi}(\omega)$ nebo $\chi(t)$ (nejpřirozeněji popisuje reakci nabitých částic na vnější harmonické pole, pulz)
- dielektrická funkce: $\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\chi}(\omega)$ (vystupuje v MR jako relativní permitivita)
- komplexní index lomu: $\hat{n}(\lambda) = n(\lambda) + \mathrm{i}k(\lambda) = \sqrt{\hat{\varepsilon}(\lambda)}$ (vystupuje v rovinné vlně, řešení VR)
- vodivost: $\sigma(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon_\mathrm{i}(\omega)$ (vhodná pro vodivé materiály)
- ztrátová funkce (loss function): $L(\omega) = -\Im\left(\hat{\varepsilon}^{-1}(\omega)\right)$ (popisuje brždění el. nabité částice)
- funkce síly přechodu (transition strength function): $F(E) = E\varepsilon_\mathrm{i}(E)$ (sumační pravidlo)
- funkce pravděpodobnosti přechodu (transition probability function, většinou označovaná jako joint density of states JDOS): $J(E) = E^2\varepsilon_\mathrm{i}(E)$

Všechny zmíněné funkce (kromě $\chi(t)$) můžeme definovat jako komplexní:

$$\hat{\sigma}(\omega) = -\mathrm{i}\varepsilon_0\omega\hat{\varepsilon}(\omega) \qquad \text{nebo} \qquad \hat{L}(\omega) = -\mathrm{i}\hat{\varepsilon}^{-1}(\omega)$$

i když pro úplný popis stačí jen jedna komponenta.

Úvod – Disperzní modely

Dielektrická funkce (i všechny ostatní funkce) musí splňovat tři základní podmínky:

1. **Časově reverzní symetrie (time-reversal symmetry):**

$$\hat{\varepsilon}(\omega) = \hat{\varepsilon}^*(-\omega)$$

2. **Kramers–Kronigovy relace:**

$$\varepsilon_{\mathrm{r}}(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi - \omega}\,\mathrm{d}\xi \qquad \text{nebo} \qquad \varepsilon_{\mathrm{r}}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \fint_{0}^{\infty} \frac{\xi\,\varepsilon_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi^2 - \omega^2}\,\mathrm{d}\xi$$

3. **Sumační pravidlo (f-sum rule):**

$$\int_0^{\infty} \varepsilon_{\mathrm{i}}(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\omega_{\mathrm{p}}^2$$

Konstanta ω_{p} se nazývaná plazmová frekvence. Tato konstanta je úměrná hustotě elektronů $\mathcal{N}_{\mathrm{e}}$ pro látky v jakémkoliv skupenství, tedy ne jen pro případ plazmatu:

$$\omega_{\mathrm{p}}^2 = \frac{e^2 \mathcal{N}_{\mathrm{e}}}{\varepsilon_0 m_{\mathrm{e}}}$$

Zbylé e, ε_0 a m_{e} jsou fyzikální konstanty.

Úvod – Disperzní modely

Dielektrická funkce (i všechny ostatní funkce) musí splňovat tři základní podmínky:

1. **Časově reverzní symetrie (time-reversal symmetry):**

$$\hat{\varepsilon}(\omega) = \hat{\varepsilon}^*(-\omega)$$

2. **Kramers–Kronigovy relace:**

$$\varepsilon_\mathrm{r}(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_\mathrm{i}(\xi)}{\xi - \omega}\, \mathrm{d}\xi \qquad \text{nebo} \qquad \varepsilon_\mathrm{r}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\xi\, \varepsilon_\mathrm{i}(\xi)}{\xi^2 - \omega^2}\, \mathrm{d}\xi$$

3. **Sumační pravidlo (f-sum rule):**

$$\int_0^\infty \varepsilon_\mathrm{i}(\omega)\, \omega\, \mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2} \omega_\mathrm{p}^2$$

Konstanta ω_p se nazývaná plazmová frekvence. Tato konstanta je úměrná hustotě elektronů $\mathcal{N}_\mathrm{e}$ pro látky v jakémkoliv skupenství, tedy ne jen pro případ plazmatu:

$$\omega_\mathrm{p}^2 = \frac{e^2 \mathcal{N}_\mathrm{e}}{\varepsilon_0 m_\mathrm{e}}$$

Co je špatně na posledním vztahu?

Úvod – Disperzní modely

Dielektrická funkce (i všechny ostatní funkce) musí splňovat tři základní podmínky:

1. **Časově reverzní symetrie (time-reversal symmetry):**

$$\hat{\varepsilon}(\omega) = \hat{\varepsilon}^*(-\omega)$$

2. **Kramers–Kronigovy relace:**

$$\varepsilon_{\mathrm{r}}(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi - \omega}\,\mathrm{d}\xi \qquad \text{nebo} \qquad \varepsilon_{\mathrm{r}}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\xi\,\varepsilon_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi^2 - \omega^2}\,\mathrm{d}\xi$$

3. **Sumační pravidlo (f-sum rule):**

$$\int_0^{\infty} \varepsilon_{\mathrm{i}}(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\omega_{\mathrm{p}}^2$$

Konstanta ω_{p} se nazývaná plazmová frekvence. Tato konstanta je úměrná hustotě elektronů $\mathcal{N}_{\mathrm{e}}$ pro látky v jakémkoliv skupenství, tedy ne jen pro případ plazmatu:

$$\omega_{\mathrm{p}}^2 = \frac{e^2 \mathcal{N}_{\mathrm{e}}}{\varepsilon_0 m_{\mathrm{e}}}$$

V systému chybí kladně nabitá jádra!

Obsah

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\,\hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0\,\hat{\boldsymbol{\mu}}\,\hat{\boldsymbol{H}}$$

- $\hat{\boldsymbol{E}}$, $\hat{\boldsymbol{D}}$ elektrická intenzita a indukce
- $\hat{\boldsymbol{H}}$, $\hat{\boldsymbol{B}}$ magnetická intenzita a indukce
- $\hat{\varepsilon}$, $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ relativní permitivita a permeabilita

Jaké matematické objekty to jsou?

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\,\hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0\,\hat{\boldsymbol{\mu}}\,\hat{\boldsymbol{H}}$$

- $\hat{\boldsymbol{E}}$, $\hat{\boldsymbol{D}}$ elektrická intenzita a indukce
- $\hat{\boldsymbol{H}}$, $\hat{\boldsymbol{B}}$ magnetická intenzita a indukce
- $\hat{\varepsilon}$, $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ relativní permitivita a permeabilita

Jaké matematické objekty to jsou?
Pro statické pole:

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0\,\boldsymbol{\varepsilon}_\mathrm{r}\,\boldsymbol{E} \qquad \boldsymbol{B} = \mu_0\,\boldsymbol{\mu}_\mathrm{r}\,\boldsymbol{H}$$

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\operatorname{rot} \hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \operatorname{rot} \hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \, \hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0 \, \hat{\boldsymbol{\mu}} \, \hat{\boldsymbol{H}}$$

Abychom rovnice mohli napsat v tomto tvaru, musíme předpokládat řešení těchto rovnic v superpozici rovinných monochromatických vln:

$$\boldsymbol{E}(t, \boldsymbol{r}) = \Re \left\{ \int \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}) \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - \omega t)] \right\}$$

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\,\hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0\,\hat{\boldsymbol{\mu}}\,\hat{\boldsymbol{H}}$$

Rovnice mají smysl pouze pro spektrální komponenty harmonických funkcí (Fourierovské obrazy), potom například $\mathrm{rot}\,\hat{\boldsymbol{E}} \equiv \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}$:

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{E}} + \hat{\boldsymbol{P}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{E}} + \mathcal{P}(\hat{\boldsymbol{E}}) \approx \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{E}} + \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{\chi}}\,\hat{\boldsymbol{E}}$$

Pro nízké intenzity světla můžeme předpokládat, že vektor polarizace závisí lineárně na $\hat{\boldsymbol{E}}$, tj. $\mathcal{P}(\hat{\boldsymbol{E}}) = \varepsilon_0\hat{\boldsymbol{\chi}}\,\hat{\boldsymbol{E}}$, kde susceptibilita $\hat{\boldsymbol{\chi}}$ je konstantní tenzor (lineární optika).

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\operatorname{rot} \hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \operatorname{rot} \hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \, \hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0 \, \hat{\boldsymbol{\mu}} \, \hat{\boldsymbol{H}}$$

V běžné optice navíc můžeme předpokládat $\boldsymbol{\mu} = 1$ a potom z prvních dvou MaxR a z MatR $\Longrightarrow$ **vlnová rovnice**

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \hat{\boldsymbol{E}} = -\mu_0 \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \, \frac{\partial^2 \hat{\boldsymbol{E}}}{\partial t^2} = -\frac{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}{c^2} \, \frac{\partial^2 \hat{\boldsymbol{E}}}{\partial t^2}$$

Dielektrická odezva

Tradičně se vyjde z Maxwellovy teorie a předpokládá se homogenní prostředí bez znalosti částicové podstaty hmoty. Prostředí je kvazineutrální s nabitými částicemi homogenně rozprostřenými v prostoru s vnitřní strukturou mnohem menší než se prostorově mění elektromagnetické pole. $a \ll \lambda$

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\operatorname{rot}\hat{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial\hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t} \qquad \operatorname{rot}\hat{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial\hat{\boldsymbol{D}}}{\partial t} \qquad \operatorname{div}\hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \operatorname{div}\hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Materiálové rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\,\hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{B}} = \mu_0\,\hat{\boldsymbol{\mu}}\,\hat{\boldsymbol{H}}$$

Dielektrická odezva jednotlivých materiálů je tedy reprezentována tenzorem dielektrické permitivity $\hat{\varepsilon}$, který je funkcí frekvence ω a dalších fyzikálních veličin.

Jak je to v případě $a \approx \lambda$ nebo dokonce $a \gg \lambda$? (a mřížková konstanta)
Pomocí Ewaldovy teorie lze dodefinovat, ale problémy potom nastanou na rozhraních mezi jednotlivými prostředími. Nelze jednoduše definovat vazební podmínky polí na rozhraních, ze kterých jsou odvozené Fresnelovy vztahy.

Dielektrická odezva

Dielektrická odezva (tenzor relativní dielektrické permitivity $\boldsymbol{\varepsilon}(\omega)$) závisí na mnoha fyzikálních veličin:

$$\boldsymbol{E}_{\text{ext}}, \boldsymbol{H}_{\text{ext}}, T, p, \ldots$$

Předmětem naší přednášky bude závislost odezvy primárně na frekvenci ω, tj. disperzní závislosti a ostatní veličiny budeme chápat jako vnější parametry.
Z materiálové rovnice si můžeme vyjádřit vektor polarizace $\hat{\boldsymbol{P}}$ a tenzor susceptibility $\boldsymbol{\chi}$ jako skutečnou odezvu nabitých částic na elektrické pole:

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0 \, \boldsymbol{\varepsilon} \, \hat{\boldsymbol{E}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{E}} + \hat{\boldsymbol{P}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{E}} + \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}} \, \hat{\boldsymbol{E}} \quad \Longrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{P}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}} \hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - 1$$

Připomeňme si, že předchozí rovnice vyjadřují vztahy mezi Fourierovskými komponentami polí $\boldsymbol{P}(t, \boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{E}(t, \boldsymbol{r})$ a $\boldsymbol{D}(t, \boldsymbol{r})$ a že fyzikální význam má pouze reálná část těchto rovnic vynásobená faktorem $\exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{kr} - \omega t)\right]$:

$$\Re\left\{ \quad \hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \boldsymbol{k}) \exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{kr} - \omega t)\right] = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) \, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}) \exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{kr} - \omega t)\right] \quad \right\}$$

Nechybí v té rovnici něco?

Dielektrická odezva

Dielektrická odezva (tenzor relativní dielektrické permitivity $\varepsilon(\omega)$) závisí na mnoha fyzikálních veličin:

$$\boldsymbol{E}_{\mathrm{ext}}, \boldsymbol{H}_{\mathrm{ext}}, T, p, \ldots$$

Předmětem naší přednášky bude závislost odezvy primárně na frekvenci ω, tj. disperzní závislosti a ostatní veličiny budeme chápat jako vnější parametry.
Z materiálové rovnice si můžeme vyjádřit vektor polarizace $\hat{\boldsymbol{P}}$ a tenzor susceptibility $\boldsymbol{\chi}$ jako skutečnou odezvu nabitých částic na elektrické pole:

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \varepsilon_0 \, \boldsymbol{\varepsilon} \, \hat{\boldsymbol{E}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{E}} + \hat{\boldsymbol{P}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{E}} + \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}} \, \hat{\boldsymbol{E}} \quad \Longrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{P}} = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}} \hat{\boldsymbol{E}} \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - 1$$

Připomeňme si, že předchozí rovnice vyjadřují vztahy mezi Fourierovskými komponentami polí $\boldsymbol{P}(t, \boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{E}(t, \boldsymbol{r})$ a $\boldsymbol{D}(t, \boldsymbol{r})$ a že fyzikální význam má pouze reálná část těchto rovnic vynásobená faktorem $\exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - \omega t)\right]$:

$$\Re\left\{ \quad \hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \boldsymbol{k}) \exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - \omega t)\right] = \varepsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \boldsymbol{k}) \, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}) \exp\left[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - \omega t)\right] \quad \right\}$$

I když předpokládáme, že materiál je homogenní a $\lambda \gg a$. **Prostorová disperze!**

Dielektrická odezva

$$\boldsymbol{P}(t,\boldsymbol{r}) = \varepsilon_0 \iiiint \boldsymbol{\chi}(t,\tau,\boldsymbol{r},\boldsymbol{\rho})\,\boldsymbol{E}(\tau,\boldsymbol{\rho})\,\mathrm{d}\tau\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}$$

Tři předpoklady:

1. Lokálnost – zrušíme integraci přes okolní body $\boldsymbol{\rho}$ (i když víme, že správně to není – prostorová disperze)
2. Kauzalita – $\chi_{ij}(t,\tau,\boldsymbol{r},\boldsymbol{\rho}) = 0$ pro $t < \tau$
3. Uniformní plynutí času – $(t,\tau) \to (t-\tau)$

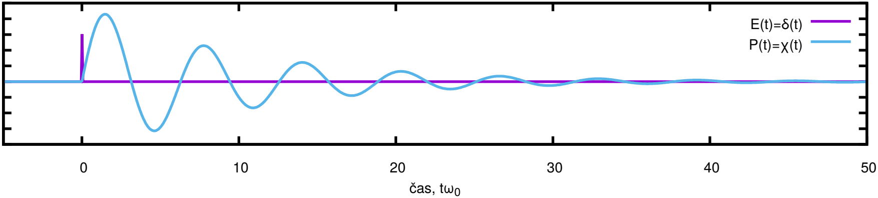
tj. tedy polarizace $\boldsymbol{P}$ závisí pouze na historii pole $\boldsymbol{E}$ v bodě $\boldsymbol{r}$. V jistém bodě $\boldsymbol{r}$ můžeme psát pro časový rozvoj a Fourierovské obrazy:

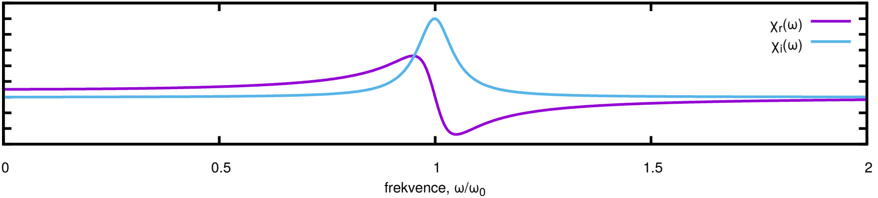
$$\boldsymbol{P}(t) = \varepsilon_0 \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau)\,\boldsymbol{E}(\tau)\,\mathrm{d}\tau \qquad \overset{\mathrm{FT}}{\Longleftrightarrow} \qquad \hat{\boldsymbol{P}}(\omega) = \varepsilon_0 \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega)\,\hat{\boldsymbol{E}}(\omega)$$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau)\exp\left[\mathrm{i}\omega(t-\tau)\right]\,\mathrm{d}t$$

Dielektrická odezva

- $\boldsymbol{P}(t)$, $\boldsymbol{E}(t)$, $\boldsymbol{\chi}(t-\tau)$ – reálné funkce (tenzory)
- $\hat{\boldsymbol{P}}(\omega)$, $\hat{\boldsymbol{E}}(\omega)$, $\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega)$ – komplexní funkce (tenzory)





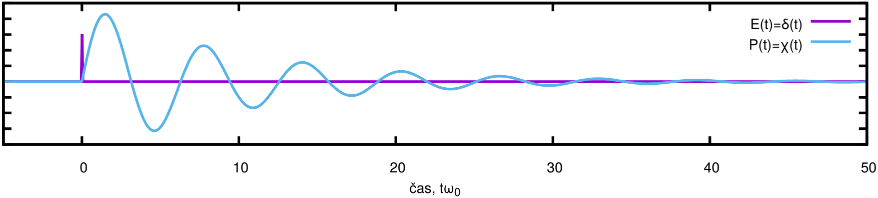
$$E(t) \sim \delta(t) \qquad P(t) \sim \sin(\omega_0 t)\exp(-t/\tau_0)\,\Theta(t) \qquad \hat{\chi}(\omega) \sim \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\omega/\tau_0} \qquad \tau_0\omega_0 = 10$$

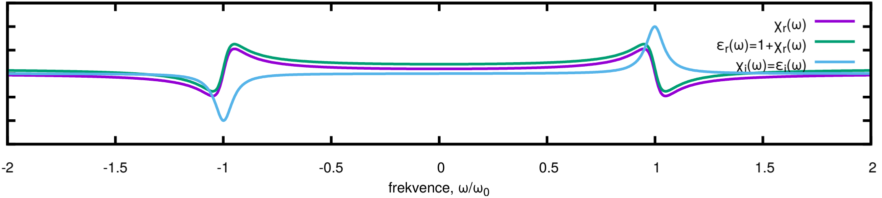
Obsah

Časově reverzní symetrie

Protože $\chi(t)$ je reálná funkce, pro Fourierovský obraz platí:

$$\hat{\chi}(\omega) = \int \chi(t-\tau)\exp\left[\mathrm{i}\omega(t-\tau)\right]\,\mathrm{d}t \quad \Longrightarrow \quad \hat{\chi}(\omega) = \hat{\chi}^*(-\omega) \quad \text{resp.} \quad \hat{\varepsilon}(\omega) = \hat{\varepsilon}^*(-\omega)$$





Proč se tomu ale tak říká?

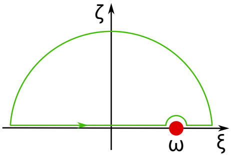
Obsah

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\chi}(\hat{\omega}) = \int \chi(t-\tau) \exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right] \exp\left[-\zeta(t-\tau)\right] \, \mathrm{d}t$$

Použijeme Cauchyho teorém, kdy z kauzality nám vyplyne jak máme integrovat:



$$\oint \frac{\hat{\chi}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega} \mathrm{d}\hat{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi - \mathrm{i}\pi \hat{\chi}(\omega) = 0$$

$$\hat{\chi}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

$$\chi_{\mathrm{r}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

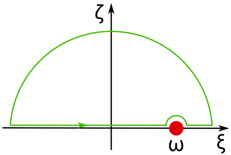
$$\chi_{\mathrm{i}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{\mathrm{r}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega}) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau) \exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right] \exp\left[-\zeta(t-\tau)\right] \, \mathrm{d}t$$

Použijeme Cauchyho teorém, kdy z kauzality nám vyplyne jak máme integrovat:



$$\oint \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega} \mathrm{d}\hat{\omega} = \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi - \mathrm{i}\pi \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = 0$$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

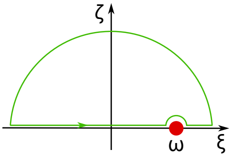
$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\xi) - \mathbf{1}}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega}) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau) \exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right] \exp\left[-\zeta(t-\tau)\right] \mathrm{d}t$$

Použijeme Cauchyho teorém, kdy z kauzality nám vyplyne jak máme integrovat:



$$\oint \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega} \mathrm{d}\hat{\omega} = \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi - \mathrm{i}\pi\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = 0$$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

Protože zároveň platí, že $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}$ je tenzor z lichých funkcí můžeme KK integrály převést pouze na integraci přes kladné hodnoty:

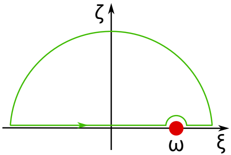
$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi} \fint_{0}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi + \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{0} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega} \mathrm{d}\xi$$

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega}) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau)\exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right]\,\exp\left[-\zeta(t-\tau)\right]\,\mathrm{d}t$$

Použijeme Cauchyho teorém, kdy z kauzality nám vyplyne jak máme integrovat:



$$\oint \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega}\mathrm{d}\hat{\omega} = \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi - \mathrm{i}\pi\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = 0$$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi}\fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi}\fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$

Protože zároveň platí, že $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}$ je tenzor z lichých funkcí můžeme KK integrály převést pouze na integraci přes kladné hodnoty:

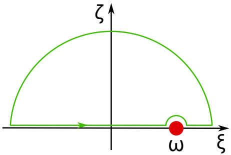
$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi}\fint_{0}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi + \frac{1}{\pi}\fint_{0}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi+\omega}\mathrm{d}\xi$$

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega}) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau) \exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right] \exp\left[-\zeta(t-\tau)\right] \mathrm{d}t$$

Použijeme Cauchyho teorém, kdy z kauzality nám vyplyne jak máme integrovat:



$$\oint \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega}\mathrm{d}\hat{\omega} = \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi - \mathrm{i}\pi\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = 0$$

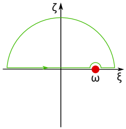
$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi}\fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{1}{\pi}\fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$

Protože zároveň platí, že $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}$ je tenzor z lichých funkcí můžeme KK integrály převést pouze na integraci přes kladné hodnoty:

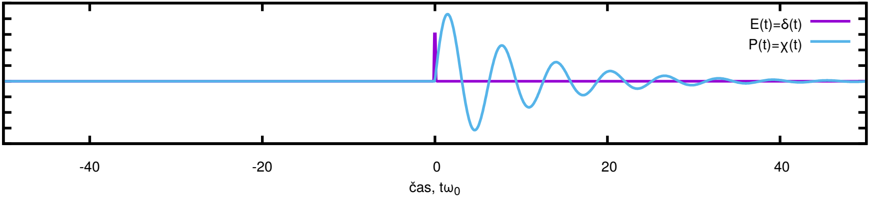
$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{r}}(\omega) = \mathbf{1} + \frac{2}{\pi}\fint_{0}^{\infty} \frac{\xi\,\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{i}}(\xi)}{\xi^2-\omega^2}\mathrm{d}\xi$$

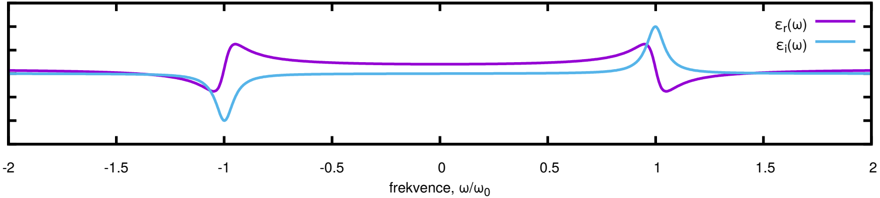
Kramers–Kronigovy relace



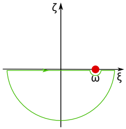
$$\chi(t) \sim \sin(\omega_0 t)\exp(-t/\tau_0)\,\Theta(t)$$ retardovaná Greenova funkce

$$\hat{\chi}(\omega) = \frac{1}{\mathrm{i}\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\hat{\chi}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$ KK reprezentují normální běh času



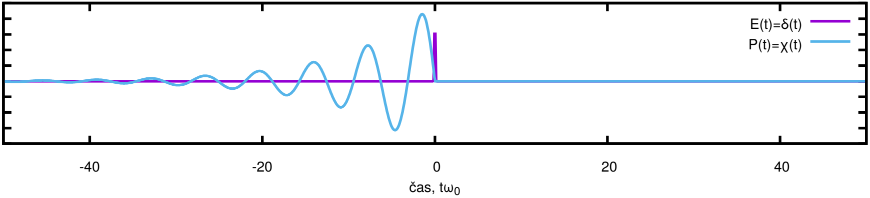


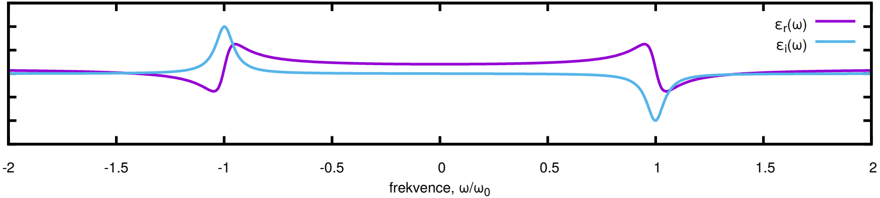
Kramers–Kronigovy relace



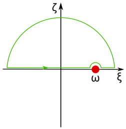
$$\chi(t) \sim -\sin(\omega_0 t)\exp(t/\tau_0)\,\Theta(-t)$$ advancovaná Greenova funkce

$$\hat{\chi}(\omega) = \frac{-1}{\mathrm{i}\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\hat{\chi}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$ otočení času $\Longrightarrow \hat{\chi}(\omega) = \hat{\chi}^*(-\omega)$

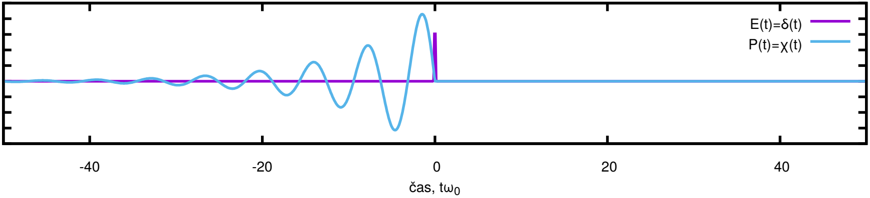


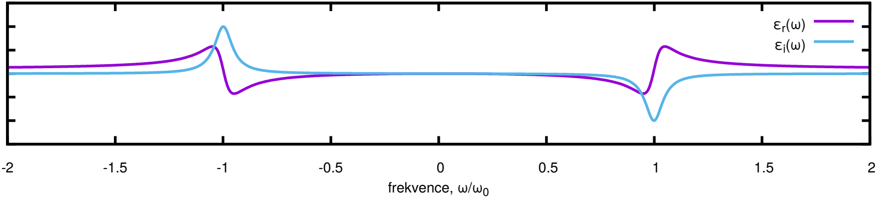


Kramers–Kronigovy relace



Kdyby odezva byla popsána advanceovanou Greenovou funkcí, ale běh času byl přirozený (integrujeme v horní polorovině) dostaneme též fyzikálně přípustné řešení (emise), které je stejně pravděpodobné jako absorpční procesy. Kdyby ale absorpční procesy byly stejně pravděpodobné jako emisní procesy $\Longrightarrow$ **neexistovala by dielektrická odezva!**





Obsah

Sumační pravidlo

Teorém superkonvergence:

$$g(y) = \int_0^\infty \frac{f(x)}{y^2 - x^2}\mathrm{d}x \qquad \text{když } f(x) \text{ klesá rychleji než } 1/x$$

tak pro velké y platí, že $g(y) \to 1/y^2$:

$$g(y) = \frac{1}{y^2}\int_0^\infty f(x)\mathrm{d}x + O\left(\frac{1}{y^2}\right)$$

Když $f(x) \to \xi\varepsilon_\mathrm{i}(\xi)$ a $g(y) \to \varepsilon_\mathrm{r}(\omega) - 1$ tak Kramers–Kronigovy relace a teorém superkonvergence vedou:

$$\int_0^\infty \omega\boldsymbol{\varepsilon}_\mathrm{i}(\omega)\mathrm{d}\omega = \text{konst. tenzor}$$

Abychom zjistili velikost této konstanty, tak musíme použít pohybové rovnice pro náboje způsobující polarizaci prostředí. Z klasické fyziky nebo pomocí dipólové aproximace z kvantové mechaniky můžeme dostat:

$$\int_0^\infty \omega\boldsymbol{\varepsilon}_\mathrm{i}(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\omega_\mathrm{p}^2\mathbf{1}$$

Obsah

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\mathrm{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Izotropní opticky neaktivní prostředí:
  amorfní látky, centrosymetrické kubické krystaly

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\mathrm{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Anizotropní prostředí – jednoosé:
  centrosymetrické trigonální, tetragonální a hexagonální krystaly

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathrm{o}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\mathrm{o}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathrm{e}} \end{pmatrix} \quad \text{např. grafit}$$

Optická osa paralelní s hlavní osou, zde zvolena ve směru osy z.

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\text{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Anizotropní prostředí – jednoosé:
  amorfní látky vystavené vnějšímu poli (elektrickému, mechanickému)

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\omega, E_z) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{(0)} + \varepsilon_{\mathrm{o}}^{(2)}|E_z|^2 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^{(0)} + \varepsilon_{\mathrm{o}}^{(2)}|E_z|^2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon^{(0)} + \varepsilon_{\mathrm{e}}^{(2)}|E_z|^2 \end{pmatrix}$$

Kerrův efekt

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\text{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Anizotropní prostředí – dvouosé:
  centrosymetrické ortorombické, monoklinické a triklinické krystaly

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{R} \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \boldsymbol{R}^{-1} \qquad \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \begin{matrix}\cos\psi\cos\phi \\ -\cos\theta\sin\psi\sin\phi\end{matrix} & \begin{matrix}-\sin\psi\cos\phi \\ -\cos\theta\cos\psi\sin\phi\end{matrix} & \sin\theta\sin\phi \\ \begin{matrix}\cos\psi\sin\phi \\ +\cos\theta\sin\psi\cos\phi\end{matrix} & \begin{matrix}-\sin\psi\sin\phi \\ +\cos\theta\cos\psi\cos\phi\end{matrix} & -\sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\psi & \sin\theta\cos\psi & \cos\theta \end{pmatrix}$$

  - ortorombická má fixní osy: $\varepsilon_x(\omega)$, $\varepsilon_y(\omega)$, $\varepsilon_z(\omega)$
  - monoklinická má jednu fixní osu: $\varepsilon_x(\omega)$, $\varepsilon_y(\omega)$, $\varepsilon_z(\omega)$, $\theta(\omega)$
  - triklinická nemá žádnou fixní osu: $\varepsilon_x(\omega)$, $\varepsilon_y(\omega)$, $\varepsilon_z(\omega)$, $\theta(\omega)$, $\psi(\omega)$, $\phi(\omega)$

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\text{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Opticky aktivní (gyrotropické) prostředí:
  Izotropní látky v magnetickém poli

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\omega, H_z) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{(0)} & \mathrm{i}\varepsilon^{(1)}H_z & 0 \\ -\mathrm{i}\varepsilon^{(1)}H_z & \varepsilon^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(2)}|H_z^2| \end{pmatrix}$$

Faradayův (magneto-optický Kerrův) efekt.

Symetrie dielektrického tenzoru

- Obecně $\boldsymbol{\varepsilon} \to \varepsilon_{ij}(\omega)$ je 3×3 tenzor mající dvě části:
  1. symetrickou část danou translační symetrií látky, která může být transformována na diagonální tenzor pootočením souřadnic do hlavních os
  2. antisymetrickou, která se může objevit jako důsledek vnějšího magnetického pole $\boldsymbol{H}_{\mathrm{ext}}$ nebo jako důsledek nelokálnosti polarizace necentrosymetrických látek

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix}}_{\text{anizotropie}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\eta_z & \mathrm{i}\eta_y \\ -\mathrm{i}\eta_z & 0 & \mathrm{i}\eta_x \\ -\mathrm{i}\eta_y & -\mathrm{i}\eta_x & 0 \end{pmatrix}}_{\text{optická aktivita}}$$

- Opticky aktivní prostředí:

Krystaly s rotujícími krystalovými rovinami

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\omega, \boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathrm{o}} & \mathrm{i}\eta k_z & 0 \\ -\mathrm{i}\eta k_z & \varepsilon_{\mathrm{o}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathrm{e}} \end{pmatrix}$$

např. křemen

Amorfní látky s chirálními molekulami

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\omega, \boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon & \mathrm{i}\eta k_z & -\mathrm{i}\eta k_y \\ -\mathrm{i}\eta k_z & \varepsilon & \mathrm{i}\eta k_x \\ \mathrm{i}\eta k_y & -\mathrm{i}\eta k_x & \varepsilon \end{pmatrix}$$

např. cukernatý roztok

Obsah

Shrnutí tří základních podmínek

- Časově reverzní symetrie – tato základní podmínka je univerzální.
- Tady prezentované Kramers–Kronigovy relace a sumační pravidlo zanedbávají prostorovou disperzi. Kramers–Kronigovy relace a sumační pravidlo zahrnující prostorovou disperzi (optickou aktivitu) jsou podobné, ale trochu složitější.
- Kramers–Kronigovy relace ve spektrální oblasti, která nás zajímá platí s dostatečnou přesností. Pro vlnové délky světla $\lambda \approx a$ je otázka jestli má smysl definovat dielektrickou funkci.
- Mnohem větší problémy nastanou při ověřování platnosti sumačního pravidla, protože platí pouze jako celek, tedy je nutné integrovat i do rentgenové oblasti spektra.
- Přes všechny problémy s platností podmínek v rentgenové oblasti, v našich disperzních modelech předpokládáme platnost všech třech základních podmínek pro dielektrickou odezvu.