Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev

Lekce 3: Alternativní konstituční materiálové rovnice

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

27. 3. 2020

Obsah

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}} = \omega \hat{\boldsymbol{B}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{H}} = -\omega \hat{\boldsymbol{D}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Vlnová rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Jak jsme si uvedly v předchozích přednáškách, aby makroskopické Maxwellovy rovnice šly upravit na vlnovou rovnici pro tlumené vlny, je nutné předpokládat lineární vztah mezi na jedné straně původními poli $\hat{\boldsymbol{E}}$ a $\hat{\boldsymbol{B}}$ a na druhé straně pomocnými poli $\hat{\boldsymbol{D}}$ a $\hat{\boldsymbol{H}}$.

Doposud jsme předpokládali, konstituční rovnice ve tvaru:

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \qquad \hat{\boldsymbol{B}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \mu_0\, \hat{\boldsymbol{\mu}}\, \hat{\boldsymbol{H}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$$

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}} = \omega \hat{\boldsymbol{B}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{H}} = -\omega \hat{\boldsymbol{D}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Vlnová rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Jak jsme si uvedly v předchozích přednáškách, aby makroskopické Maxwellovy rovnice šly upravit na vlnovou rovnici pro tlumené vlny, je nutné předpokládat lineární vztah mezi na jedné straně původními poli $\hat{\boldsymbol{E}}$ a $\hat{\boldsymbol{B}}$ a na druhé straně pomocnými poli $\hat{\boldsymbol{D}}$ a $\hat{\boldsymbol{H}}$.

Navíc jsme předpokládali nemagnetické prostředí $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \boldsymbol{1}$:

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \qquad \hat{\boldsymbol{B}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \mu_0\, \hat{\boldsymbol{H}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$$

To umožňuje napsat vlnovou rovnici ve tvaru:

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

Makroskopické Maxwellovy rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}} = \omega \hat{\boldsymbol{B}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{H}} = -\omega \hat{\boldsymbol{D}} \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

Vlnová rovnice

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\, \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Jak jsme si uvedly v předchozích přednáškách, aby makroskopické Maxwellovy rovnice šly upravit na vlnovou rovnici pro tlumené vlny, je nutné předpokládat lineární vztah mezi na jedné straně původními poli $\hat{\boldsymbol{E}}$ a $\hat{\boldsymbol{B}}$ a na druhé straně pomocnými poli $\hat{\boldsymbol{D}}$ a $\hat{\boldsymbol{H}}$.

Pouze v izotropním opticky neaktivním prostředí ($\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\varepsilon}\mathbf{1}$ a $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hat{\mu}\mathbf{1}$) můžeme psát vlnovou rovnici ve tvaru:

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\, \hat{\mu}\, \hat{\varepsilon}\, \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

protože obecně to nelze

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}\, (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}})) \neq \hat{\boldsymbol{k}} \times (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}})$$

Obsah

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Condon–Fedorův formalizmus zobecňuje konstituční rovnice následovně

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\sqrt{\epsilon_0\mu_0}\hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$$
$$\hat{\boldsymbol{B}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \mu_0\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\sqrt{\epsilon_0\mu_0}\hat{\boldsymbol{\zeta}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$$

Protože zároveň platí MacMaxR, tak pole $\hat{\boldsymbol{D}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$ můžeme napsat jako lineární funkci pole $\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0\left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\zeta}}\right)\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\omega^{-1}\hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}\left(\hat{\boldsymbol{k}}\times\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)$$

podobná rovnice platí pro pole $\hat{\boldsymbol{B}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$ a $\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$

$$\hat{\boldsymbol{B}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \mu_0\left(\hat{\boldsymbol{\mu}} + \hat{\boldsymbol{\zeta}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\xi}}\right)\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) - \mathrm{i}\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}\omega^{-1}\hat{\boldsymbol{\zeta}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{-1}\left(\hat{\boldsymbol{k}}\times\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)$$

Za předpokladu, že se prostředím šíří **homogenní rovinná vlna** můžeme komplexní vlnový vektor vyjádřit pomocí směrového vektoru:

$$\hat{\boldsymbol{k}} = \frac{\omega}{c}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\,\boldsymbol{\nu}$$

kde $\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$ je komplexní skalární funkce definovaná $\hat{n}^2 = c^2(\hat{\boldsymbol{k}}\hat{\boldsymbol{k}})/\omega^2$

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Potom zobecněné konstituční rovnice mají tvar

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0 \left[\left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\zeta}}\right)\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1}\left(\boldsymbol{\nu}\times\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)\right]$$

$$\hat{\boldsymbol{B}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \mu_0 \left[\left(\hat{\boldsymbol{\mu}} + \hat{\boldsymbol{\zeta}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\xi}}\right)\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) - \mathrm{i}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{\zeta}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{-1}\left(\boldsymbol{\nu}\times\hat{\boldsymbol{H}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)\right]$$

který je totožný s tvarem lineární dielektrické odezvy izotropního prostředí zapsané do lineárního členu v $\boldsymbol{\nu}$ pomocí gyračního tenzoru:

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0 \left[\left(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\chi}}_{\mathrm{S}}^{(0)}(\omega)\right)\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{g}}(\omega)\left(\boldsymbol{\nu}\times\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)\right]$$

když předpokládáme závislost tenzorů pouze na frekvenci ω. Ze symetrie dielektrické odezvy členu nezávislého na $\boldsymbol{\nu}$ vyplývá, že:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\omega) = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{T}}(\omega), \qquad \hat{\boldsymbol{\mu}}(\omega) = \hat{\boldsymbol{\mu}}^{\mathrm{T}}(\omega), \qquad \hat{\boldsymbol{\zeta}}(\omega) = \hat{m}\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}(\omega)$$

- $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ a $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ jsou symetrické tenzory (6+6 spektrálních funkcí)
- $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ je tenzor bez symetrie (9 spektrálních funkcí)
- $\hat{\boldsymbol{\zeta}}$ je tenzor závislý na tenzoru $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ pomocí libovolné konstanty $\hat{m}$

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Zobecněná vlnová rovnice má tvar

$$
\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \left(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \right) \\
&\quad + \frac{\omega^2}{c^2} \left(\hat{\varepsilon} + \hat{\boldsymbol{\xi}} \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \hat{\zeta} \right) \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i} \frac{\omega}{c} \left[\hat{\boldsymbol{\xi}} \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \left(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \right) - \hat{\boldsymbol{k}} \times \left(\hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \hat{\zeta} \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \right) \right] \\
&\qquad = \mathbf{0}
\end{aligned}
$$

versus **tradiční vlnová rovnice**

$$
\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}^{-1} (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\varepsilon} \hat{\boldsymbol{E}} = \mathbf{0}
$$

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Když předpokládáme $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{1}$ a **homogenní rovinné vlny**, pak pouze potom **zobecněná vlnová rovnice** má tvar

$$\begin{aligned} &\hat{\boldsymbol{k}} \times \left(\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right) \\ &\quad + \frac{\omega^2}{c^2}\left(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\zeta}}\right)\hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) + \mathrm{i}\frac{\omega^2}{c^2}\hat{n}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\left[\hat{\boldsymbol{\xi}}\left(\boldsymbol{\nu} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right) - \boldsymbol{\nu} \times \left(\hat{m}\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right)\right] \\ &\quad\quad = \mathbf{0} \end{aligned}$$

versus **tradiční vlnová rovnice**

$$\hat{\boldsymbol{k}} \times (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{E}}) + \frac{\omega^2}{c^2}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\omega, \boldsymbol{\nu})\hat{\boldsymbol{E}} = \mathbf{0}$$

Aby třetí člen ve vlnové rovnici byl antisymetrický, nebo šel napsat v izotropním případě pomocí gyračního tenzoru následovně

$$\mathrm{i}\frac{\omega^2}{c^2}\hat{n}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\left[\hat{\boldsymbol{\xi}}\left(\boldsymbol{\nu} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right) - \boldsymbol{\nu} \times \left(\hat{m}\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right)\right] = \mathrm{i}\frac{\omega^2}{c^2}\hat{\boldsymbol{g}}(\omega)\left(\boldsymbol{\nu} \times \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\right)$$

je nutné aby:

1. v případě izotropního prostředí libovolné $\hat{m}$, např. $\hat{m} = 0$
2. v případě anizotropního prostředí musí platit $\hat{m} = -1$, potom

$$\hat{\boldsymbol{g}}(\omega) = \hat{n}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{\xi}}$$

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Člen závislý na vlnovém vektoru (antisymetrická část) je antisymetrický

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\left[\hat{\boldsymbol{\xi}}\left(\boldsymbol{\nu}\times\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)-\boldsymbol{\nu}\times\left(\hat{m}\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)\right]\\
&=\mathrm{i}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\left[\hat{\boldsymbol{\xi}}\left(\boldsymbol{\nu}\times\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)+\boldsymbol{\nu}\times\left(\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\right)\right]\\
&=\mathrm{i}\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\left[\nu_x\begin{pmatrix}0 & -\hat{\xi}_{xz}(\omega) & \hat{\xi}_{xy}(\omega)\\ \hat{\xi}_{xz}(\omega) & 0 & \hat{\xi}_{yy}(\omega)+\hat{\xi}_{zz}(\omega)\\ -\hat{\xi}_{xy}(\omega) & -\hat{\xi}_{yy}(\omega)-\hat{\xi}_{zz}(\omega) & 0\end{pmatrix}\right.\\
&\qquad+\nu_y\begin{pmatrix}0 & -\hat{\xi}_{yz}(\omega) & -\hat{\xi}_{xx}(\omega)-\hat{\xi}_{zz}(\omega)\\ \hat{\xi}_{yz}(\omega) & 0 & -\hat{\xi}_{yx}(\omega)\\ \hat{\xi}_{xx}(\omega)+\hat{\xi}_{zz}(\omega) & \hat{\xi}_{yx}(\omega) & 0\end{pmatrix}\\
&\qquad\left.+\nu_z\begin{pmatrix}0 & \hat{\xi}_{xx}(\omega)+\hat{\xi}_{yy}(\omega) & \hat{\xi}_{zy}(\omega)\\ -\hat{\xi}_{xx}(\omega)-\hat{\xi}_{yy}(\omega) & 0 & -\hat{\xi}_{zx}(\omega)\\ -\hat{\xi}_{zy}(\omega) & \hat{\xi}_{zx}(\omega) & 0\end{pmatrix}\right]\\
&\qquad=\nu_x\hat{\boldsymbol{\chi}}_{\mathrm{A},x}(\omega)+\nu_y\hat{\boldsymbol{\chi}}_{\mathrm{A},y}(\omega)+\nu_z\hat{\boldsymbol{\chi}}_{\mathrm{A},z}(\omega)=\hat{\boldsymbol{\chi}}_{\mathrm{A}}^{(1)}(\omega,\boldsymbol{\nu})
\end{aligned}
$$

Zobecněný tvar konstitučních materiálových rovnic

Tato antisymetrická část lze napsat pomocí gyračního tenzoru který má tento tvar:

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{g}}(\omega) &= \hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\left[\mathrm{tr}\left(\hat{\boldsymbol{\xi}}(\omega)\right)\mathbf{1} - \hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}(\omega)\right] \\ &= \hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\begin{pmatrix} \hat{\xi}_{yy}(\omega)+\hat{\xi}_{zz}(\omega) & -\hat{\xi}_{yx}(\omega) & -\hat{\xi}_{zx}(\omega) \\ -\hat{\xi}_{xy}(\omega) & \hat{\xi}_{xx}(\omega)+\hat{\xi}_{zz}(\omega) & -\hat{\xi}_{zy}(\omega) \\ -\hat{\xi}_{xz}(\omega) & -\hat{\xi}_{yz}(\omega) & \hat{\xi}_{xx}(\omega)+\hat{\xi}_{yy}(\omega) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

- V případě homogenních rovinných vln, je tedy zřejmé, že zobecněný **Condon–Fedorův** formalismus je ekvivalentní s tradičním (**Landauovým**) formalismem, kde smíšené E–M členy nevystupují.
- **Condon–Fedorův** formalismus je elegantní způsob jak zapsat lineární dielektrickou odezvu s prostorovou disperzí aproximovanou do lineárního členu.
- Tři základní pravidla musí být aplikovaná na spektrální funkce vzniklé zápisem $\hat{\varepsilon} - \hat{\boldsymbol{\xi}}\hat{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{T}}$ a na funkce $\hat{n}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})\hat{\xi}_{yx}(\omega)$, což je velmi komplikované, až nemožné.
- V případě nehomogenních vln **Condon–Fedorův** formalismus selže.
- Tedy **Condon–Fedorův** formalismus se hodí pro krystalovou optiku neabsorbujících materiálů a je nevhodný pro použití v elipsometrii studující absorbujících systémů.