Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev
Lekce 2: Nelokální lineární dielektrická odezva

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

28. 2. 2022

Obsah

Úvod – Disperze ve vakuu

Jak víme základem teorie lineární dielektrické odezvy jsou **makroskopické Maxwellovy rovnice**:

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

Tyto rovnice jsou formálně totožné **Maxwellovy rovnice ve vakuu**

$$\operatorname{rot}\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \qquad \operatorname{rot}\boldsymbol{B} = \mu_0\epsilon_0\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} \qquad \operatorname{div}\boldsymbol{E} = 0 \qquad \operatorname{div}\boldsymbol{B} = 0$$

Makroskopické Maxwellovy rovnice nepopisují kompletní EM pole. Jsou zavedeny tak, aby vedly k **vlnové rovnici**. Vlnová rovnice ve vakuu má tvar:

$$\triangle\boldsymbol{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0 \qquad \frac{1}{c^2} = \mu_0\epsilon_0$$

Ve vakuu můžeme psát

$$\boldsymbol{D}(t,\boldsymbol{r}) = \epsilon_0\boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r}) \qquad \boldsymbol{B}(t,\boldsymbol{r}) = \mu_0\boldsymbol{H}(t,\boldsymbol{r})$$

respektive, jakoby odezva byla “časoprostorově lokální”:

$$\boldsymbol{D}(t,\boldsymbol{r}) = \epsilon_0\iiiint_{-\infty}^{\infty}\delta(t-\tau,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{E}(\tau,\boldsymbol{\rho})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\rho}\,\mathrm{d}\tau \qquad \boldsymbol{B}(t,\boldsymbol{r}) = \dots$$

Úvod – Disperze ve vakuu

Lze zavést **Fourierovu transformaci**

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}) = \iiiint_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{E}(t, \boldsymbol{r}) \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{r} - \omega t)]\ \mathrm{d}^3 r\ \mathrm{d}t$$

a psát MaxR a Vlnovou rovnici v reciprokém prostoru následovně

$$\boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{E}} = \omega \hat{\boldsymbol{B}} \qquad \boldsymbol{k} \times \hat{\boldsymbol{B}} = -\frac{\omega}{c^2} \hat{\boldsymbol{E}} \qquad \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{E}} = 0 \qquad \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

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

Z řešení vlnové rovnice vyplývá lineární disperzní relace mezi frekvencí a vlnovým vektorem

$$\boldsymbol{k} = \frac{\omega}{c} \boldsymbol{\nu}$$

- $\boldsymbol{\nu}$ směrový vektor
- c rychlost světla ve vakuu (stejná pro všechny frekvence)

V hmotném prostředí je vztah mezi frekvencí a vlnovým vektorem mnohem složitější (speciálně v případě prostředí s prostorovou disperzí) a v praxi je popisovám **disperzními modely**.

Obsah

Nelokální lineární dielektrická odezva

Fourierovou transformací lze MMR a VR převést do reciprokých souřadnic $(t, \boldsymbol{r}) \to (\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})$ podobně jako v případě rovnic ve vakuu:

$$\boldsymbol{k}_\mathrm{r} \times \hat{\boldsymbol{E}} = \omega \hat{\boldsymbol{B}} \qquad \boldsymbol{k}_\mathrm{r} \times \hat{\boldsymbol{H}} = -\omega \hat{\boldsymbol{D}} \qquad \boldsymbol{k}_\mathrm{r} \cdot \hat{\boldsymbol{D}} = 0 \qquad \boldsymbol{k}_\mathrm{r} \cdot \hat{\boldsymbol{B}} = 0$$

$$\boldsymbol{k}_\mathrm{r} \times \boldsymbol{k}_\mathrm{r} \times \hat{\boldsymbol{E}} + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Lineární dielektrická odezva je pak definovaná jednoduše:

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \epsilon_0 \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})$$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \iiiint_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\chi}(t, \boldsymbol{r}) \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{r}\boldsymbol{r} - \omega t)] \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \, \mathrm{d}t$$

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \epsilon_0 \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) + \hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})$$

Konstituční rovnice

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \epsilon_0 \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \qquad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{1} + \hat{\boldsymbol{\chi}}$$

- FT lze provést pouze na konečném prostoru pokud je řešením tlumená harmonická vlna či evanescentní vlana.

Obsah

Harmonické vlny v nedisipativním prostředí

V hmotném prostředí se mohou šířit harmonické rovinné vlny, pokud vlna cestou neztrácí energii. Taková harmonická vlna je řešením vlnové rovnice

$$\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}} \times \hat{\boldsymbol{E}} + \frac{\omega^2}{c^2}\,\hat{\varepsilon}\,\hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Pro určitou frekvenci ω a směr $\boldsymbol{\nu}$ existují maximálně **dvě homogenní vlny** popsané reálným vlnovým vektorem $\boldsymbol{k}_{r,\nu}$ a obecně komplexní polarizačním vektorem $\hat{\boldsymbol{p}}_{\nu}$ vyhovující rovnici

$$\boldsymbol{k}_{r,\nu} \times \boldsymbol{k}_{r,\nu} \times \hat{\boldsymbol{p}}_{\nu} + \frac{\omega^2}{c^2}\,\hat{\varepsilon}\,\hat{\boldsymbol{p}}_{\nu} = \boldsymbol{0}$$

přičemž lze dokázat, že musí platit

$$\hat{\varepsilon}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}) = \hat{\varepsilon}^{\dagger}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}})$$

kde symbol † značí **hermiteovské sdružení**.
Dolní index ν rozlišuje dvě homogenní vlny (vlastní módy šíření harmonické vlny).
V případě prostředí bez prostorové disperze je dielektrický tenzor ryze reálný a symetrický:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\omega) = \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}(\omega)$$

Obsah

Evanescentní vlny v nedisipativním prostředí

V konečném hmotném prostředí též mohou pro určité frekvence existovat evanescentní vlny (pole), které též neztrácí energii. Takové pole je řešením rovnice

$$\boldsymbol{k}_{\mathrm{i}} \times \boldsymbol{k}_{\mathrm{i}} \times \hat{\boldsymbol{E}} - \frac{\omega^2}{c^2}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\,\hat{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0}$$

Evanescentní vlana v nekonečné bláně (osa z je kolmá na blánu):

$$\boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r}) = \exp(-k_{\mathrm{i},\nu} z)\,\Re\left\{\hat{\boldsymbol{E}}_0 \exp(\mathrm{i}\omega_0 t)\right\}$$

a Fourierův obraz:

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{E}}(\omega,\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}) &= \int_{-d/2}^{d/2}\iiint_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r}) \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}\boldsymbol{r} - \omega t)]\;\mathrm{d}t\;\mathrm{d}x\;\mathrm{d}y\;\mathrm{d}z \\ &= \frac{(2\pi)^3}{2}\left[\hat{\boldsymbol{E}}_0\;\delta(\omega-\omega_0) + \hat{\boldsymbol{E}}_0^*\;\delta(\omega+\omega_0)\right]\;\delta(k_x)\;\delta(k_y)\;d\,\mathrm{sinc}[(k_z - \mathrm{i}k_{\mathrm{i},\nu})d/2]\end{aligned}$$

Když zanedbáme efekty na rozhraní, stejný vztah můžeme psát i pro pole $\hat{\boldsymbol{P}}(\omega,\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}})$, kde místo amplitudy $\hat{\boldsymbol{E}}_0$ píšeme amplitudu $\hat{\boldsymbol{P}}_0$.

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\omega,\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}) = \frac{(2\pi)^3}{2}\left[\hat{\boldsymbol{P}}_0\;\delta(\omega-\omega_0) + \hat{\boldsymbol{P}}_0^*\;\delta(\omega+\omega_0)\right]\;\delta(k_x)\;\delta(k_y)\;d\,\mathrm{sinc}[(k_z - \mathrm{i}k_{\mathrm{i},\nu})d/2]$$

Evanescentní vlny v nedisipativním prostředí

Z definice homogenní dielektrické odezvy

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}) = \epsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}}) \, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}})$$

můžeme provést zpětnou Fourierovu transformaci.
Dále pro obě funkce i pro $\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \boldsymbol{k}_{\mathrm{r}})$ můžeme provést analytické rozšíření $\boldsymbol{k}_{\mathrm{r}} \to \hat{\boldsymbol{k}}$

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \frac{(2\pi)^3}{2} \left[\hat{\boldsymbol{E}}_0 \; \delta(\omega - \omega_0) + \hat{\boldsymbol{E}}_0^* \; \delta(\omega + \omega_0) \right] \; \delta(k_x) \; \delta(k_y) \; d \, \mathrm{sinc}[(\hat{k}_z - \mathrm{i} k_{\mathrm{i},\nu}) d/2]$$

Protože pro velká d a reálná x platí

$$d \, \mathrm{sinc}[xd/2] \to 2\pi \delta(x)$$

tak můžeme ve zpětné Fourierově transformaci integraci přes osu k_z posunout o $k_{\mathrm{i},\nu}$, tj. $k_z + \mathrm{i} k_{\mathrm{i},\nu}$ a tím vyjádřit výsledný vztah mezi komplexními amplitudami:

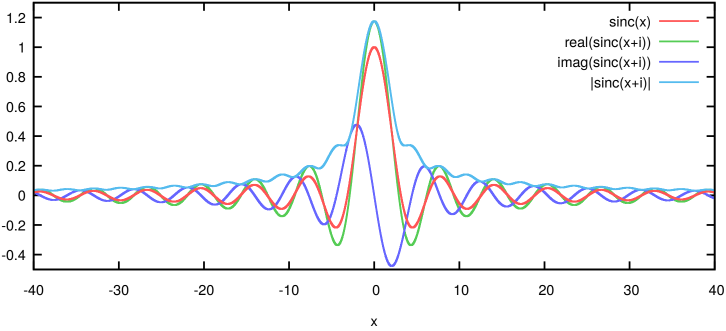
$$\hat{\boldsymbol{P}}_0 = \epsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega_0, \mathrm{i} \boldsymbol{k}_{\mathrm{i},\nu}) \hat{\boldsymbol{E}}_0$$

kde výraz $\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega_0, \mathrm{i} \boldsymbol{k}_{\mathrm{i},\nu})$ odpovídá hodnotě analytického rozšíření $\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$ v bodě $\omega = \omega_0$ a $\hat{\boldsymbol{k}} = \mathrm{i} \boldsymbol{k}_{\mathrm{i},\nu}$. Jinak napsáno

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$$

Evanescentní vlny v nedisipativním prostředí

Funkce sinc na reálné ose a přímce paralelní s reálnou osou.



Je vidět, že imaginární část sinc funkce je funkce lichá, tedy nepřispívá do nevlastních integrálů (v limitě pro velká d).

Reálná část sinc funkce mimo reálnou osu je podobná sinc funkci na reálné ose, ale zvětší se oscilace. Z toho vyplývá, že zanedbání imaginární složky vlnového vektoru nemusí být špatná aproximace.

Obsah

Závěr

- Podobně jako u evanescentních vln bychom mohli postupovat v případě tlumených (zesilovaných) vln a napsat zobecněnou definici dielektrické odezvy

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \epsilon_0 \, \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) \, \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$$

- Jak ale uvidíme později analytické rozšíření není praktická volba pro modelování dielektrické odezvy kvůli velmi “neposlušnému” chování odezvové funkce mimo reálnou osu vlnového vektoru.
- Navíc Kramers-Kronigovy relace a sumační pravidla nejsou dobře definované pro analytická rozšíření.
- Proto v praxi dielektrickou odezvu vykazující prostorovou disperzi je dobré modelovat pomocí neanalytických funkcí v $\hat{\boldsymbol{k}}$ vektoru, kdy tyto funkce považujeme jako nižší aproximaci ve srovnání s lokální dielektrickou odezvou.