Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev
Lekce 4: Alternativní konstituční materiálové rovnice

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

21. 3. 2022

Obsah

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

Makroskopické Maxwellovy rovnice

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

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:

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

Vlnová rovnice

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

Pouze v **izotropním prostředí** můžeme psát vlnovou rovnici ve tvaru:

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

protože obecně to nelze

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

Disperze je potom dána tenzorem $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\hat{\boldsymbol{\mu}}$ (z šíření nelze rozlišit mezi elektrickou a magnetickou částí).

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

Vlnovou rovnici lze elegantně psát maticově pomocí antisymetrických matic vyjádřených pomocí **Hodgeho hvězdičkového operátoru**

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

$$\star\hat{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{k}_z & -\hat{k}_y \\ -\hat{k}_z & 0 & \hat{k}_x \\ \hat{k}_y & -\hat{k}_x & 0 \end{pmatrix}$$

V izotropním případě

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

V běžné optice $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{1}$

V obecném případě bez disipace

Aby řešením vlnové rovnice v bezztrátovém prostředí byla harmonická rovinná vlna, tak je vyžadováno aby tenzor odezvy byl Hermiteovský

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

Tradiční tvar konstitučních materiálových rovnic

obecně tenzor závisí i na ostatních vnějších parametrech

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

ale vždy platí, že symetrická část tenzoru je ryze reálná a antisymetrická část je ryze imaginární.

V obecném případě s disipací bez vnějšího magnetického pole

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

V obecném případě s disipací s vnějším magnetickým polem

$$\hat{\varepsilon}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}, \boldsymbol{B}_\mathrm{ext}) = \hat{\varepsilon}^\mathrm{T}(\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r}, -\boldsymbol{B}_\mathrm{ext})$$

Toto vyplývá z vlastností Lorenzovy síly. $\boldsymbol{B}_\mathrm{ext}$ je vnější statické magnetické pole.

Obsah

Alternativní tvar konstitučních materiálových rovnic

Condon–Fedorův formalizmus zobecňuje konstituční rovnice následovně

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

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

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

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

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

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

Aby Condon–Fedorův formalizmus dával smysl, je nutné předpokládat, že tenzory $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{c}}$, $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}$, $\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}$, $\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\mathrm{c}}$, nezávisí na $\hat{\boldsymbol{k}}$, jinak nejsou jednoznačné.
Vztah mezi elektrickou a magnetickou složkou je jednoznačně určen MacMaXR a není ho nutné zavádět v materiálových vztazích.

Alternativní tvar konstitučních materiálových rovnic

Potom ale Condon–Fedorův formalizmus neumí popsat obecný tvar závislosti na vlnovém vektoru $\hat{\boldsymbol{k}}$:

$$\hat{\varepsilon}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{c}}(\omega) + \hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}(\omega)^{-1}\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\mathrm{c}}(\omega) + \mathrm{i}\frac{c}{\omega}\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}(\omega)^{-1}\star\hat{\boldsymbol{k}}$$
$$\hat{\boldsymbol{\mu}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}(\omega) + \hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\varepsilon}_{\mathrm{c}}(\omega)^{-1}\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega) - \mathrm{i}\frac{c}{\omega}\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\varepsilon}_{\mathrm{c}}(\omega)^{-1}\star\hat{\boldsymbol{k}}$$

Pouze v izotropním případě lze odezvu aproximovat do lineárního členu Taylorova rozvoje následovně

$$\hat{\varepsilon}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \mathbf{1} + \hat{\chi}^{(0)}(\omega)\mathbf{1} + \hat{\chi}^{(1)}(\omega)\star\hat{\boldsymbol{k}}$$
$$\hat{\boldsymbol{\mu}}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \mathbf{1} + \hat{\phi}^{(0)}(\omega)\mathbf{1} + \hat{\phi}^{(1)}(\omega)\star\hat{\boldsymbol{k}}$$

Navíc, aby mohla existovat v prostředí harmonická vlna (prostředí bez disipace), tak musí platit

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

Tedy pouze $6+6+9=21$ nezávislých spektrálních funkcí versus 30 v Landauově formalismu.

Alternativní tvar konstitučních materiálových rovnic

Zobecněná vlnová rovnice má tvar

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

respektive

$$\left(\star\hat{\boldsymbol{k}}\, \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1} \star\hat{\boldsymbol{k}} + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\boldsymbol{w}}\right) \hat{\boldsymbol{E}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \boldsymbol{0}$$

kde tenzor $\hat{\boldsymbol{w}}$ lineárně závisí na vlnovém vektoru $\hat{\boldsymbol{k}}$:

$$\hat{\boldsymbol{w}}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{S}}^{(0)}(\omega) + \hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A}}^{(1)}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}})$$

kde symetrický člen nezávislý na $\hat{\boldsymbol{k}}$

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{S}}^{(0)}(\omega) = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{c}}(\omega) - \hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega) \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1}(\omega) \hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}^{\mathrm{T}}(\omega)$$

odpovídá Condon–Fedorově členu nezávislému na $\hat{\boldsymbol{k}}$ v přepsané 1. konstituční rovnici.

Alternativní tvar konstitučních materiálových rovnic

Asymetrický člen vystupujíc ve vlnové rovnici lineárně závislý na vlnovém vektoru $\hat{\boldsymbol{k}}$

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A}}^{(1)}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) &= \mathrm{i}\frac{c}{\omega}\left(\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1}(\omega)\star\hat{\boldsymbol{k}} + \star\hat{\boldsymbol{k}}\,\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1}(\omega)\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}^{\mathrm{T}}(\omega)\right)\\ &= \mathrm{i}\frac{c}{\omega}\left[\hat{k}_x\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},x}^{(1)}(\omega) + \hat{k}_y\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},y}^{(1)}(\omega) + \hat{k}_z\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},z}^{(1)}(\omega)\right]\end{aligned}$$

nekoresponduje lineárnímu členu vystupující v přepsané 1. konstituční rovnici

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1}(\omega)\star\hat{\boldsymbol{k}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}(\omega)\star\hat{\boldsymbol{k}}$$

Jednotlivé složky antisymetrického tenzoru mají tvar

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},x}^{(1)}(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\theta}_{xz}(\omega) & \hat{\theta}_{xy}(\omega)\\ \hat{\theta}_{xz}(\omega) & 0 & \hat{\theta}_{yy}(\omega)+\hat{\theta}_{zz}(\omega)\\ -\hat{\theta}_{xy}(\omega) & -\hat{\theta}_{yy}(\omega)-\hat{\theta}_{zz}(\omega) & 0\end{pmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},y}^{(1)}(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\theta}_{yz}(\omega) & -\hat{\theta}_{xx}(\omega)-\hat{\theta}_{zz}(\omega)\\ \hat{\theta}_{yz}(\omega) & 0 & -\hat{\theta}_{yx}(\omega)\\ \hat{\theta}_{xx}(\omega)+\hat{\theta}_{zz}(\omega) & \hat{\theta}_{yx}(\omega) & 0\end{pmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A},z}^{(1)}(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\theta}_{xx}(\omega)+\hat{\theta}_{yy}(\omega) & \hat{\theta}_{zy}(\omega)\\ -\hat{\theta}_{xx}(\omega)-\hat{\theta}_{yy}(\omega) & 0 & -\hat{\theta}_{zx}(\omega)\\ -\hat{\theta}_{zy}(\omega) & \hat{\theta}_{zx}(\omega) & 0\end{pmatrix}$$

Alternativní tvar konstitučních materiálových rovnic

Lineární člen $\hat{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{A}}^{(1)}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}})$ je zvykem psát pomocí bezrozměrného gyračního tenzoru $\hat{\boldsymbol{g}}(\omega)$:

$$\hat{w}_{\mathrm{A},jk}^{(1)}(\omega,\hat{\boldsymbol{k}}) = \sum_{lm} \mathrm{i}\frac{c}{\omega}\, e_{jkl}\, \hat{g}_{lm}(\omega)\, \hat{k}_m$$

kde e_{jkl} je Levi–Civitův symbol.
Gyrační tenzor lze vyjádřit z tenzoru $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\omega) = \hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{c}}(\omega)\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{c}}^{-1}(\omega)$ následovně

$$\hat{\boldsymbol{g}}(\omega) = \mathrm{tr}\Big(\hat{\boldsymbol{\theta}}(\omega)\Big)\,\mathbf{1} - \hat{\boldsymbol{\theta}}^{\mathrm{T}}(\omega) =$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\theta}_{yy}(\omega)+\hat{\theta}_{zz}(\omega) & -\hat{\theta}_{yx}(\omega) & -\hat{\theta}_{zx}(\omega) \\ -\hat{\theta}_{xy}(\omega) & \hat{\theta}_{xx}(\omega)+\hat{\theta}_{zz}(\omega) & -\hat{\theta}_{zy}(\omega) \\ -\hat{\theta}_{xz}(\omega) & -\hat{\theta}_{yz}(\omega) & \hat{\theta}_{xx}(\omega)+\hat{\theta}_{yy}(\omega) \end{pmatrix}$$

kde $\mathrm{tr}()$ je stopa.

Závěr

- Je tedy zřejmé, že zobecněný **Condon–Fedorův** formalismus je ekvivalentní s tradičním (**Landauovým**) formalismem, kde smíšené E–M členy nevystupují, přičemž E-M členy jsou nadbytečné.
- **Condon–Fedorův** formalismus má smysl zavádět pouze pro tenzory nezávislé na vlnovém vektoru.
- **Condon–Fedorův** formalismus je elegantní způsob jak zapsat lineární dielektrickou odezvu s prostorovou disperzí aproximovanou do lineárního členu bez tenzorů závislých na $\hat{\boldsymbol{k}}$.
- Je otázka jak aplikovat **tři základní pravidla**.
- V rámci **Condon–Fedorova** formalismu nelze korektně implementovat disperzní modely s komplikovanější než lineární závislostí na $\hat{\boldsymbol{k}}$. Je tedy aplikovatelný pouze v transparentní oblasti za předpokladu, že $\hat{\boldsymbol{k}}$ je malé.