

# **Pokročilé disperzní modely v optice tenkých vrstev**

## Lekce 6: Vibrace atomové mříže – fonony

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

30. 4. a 7. 5. 2020

# Obsah

- 1 Vibrace atomové mříže – fonony
- 2 Plošně centrované kubické krystaly s 1–2 atomy na elementární buňku
- 3 Tři a více atomů v kubické mříži

# Vibrace atomové mříže – fonony

- **Vibrace atomové mříže** – pojem z klasické fyziky. V pevných látkách  $N$  vázaných částic má  $3(N - 1)$  stupňů volnosti, čemuž odpovídá v harmonické aproximaci  $3(N - 1)$  **vibračních módů**. Při malých výchylkách každý mód může být vybuzen libovolnou energií.
- **Fonon** – pojem z kvantové mechaniky reprezentující **kvantově mechanický oscilátor**, který koresponduje s klasickým vibračním módem (v pevné látce máme  $3(N - 1)$  fononů). Celková energie fononů nabývá diskretních hodnot.

$$E_{\text{ph}} = \sum_p n_p \hbar \omega_p \quad n_p = f^{BE}(E_p, T) = \frac{1}{\exp(E_p/k_B T) - 1}$$

$n_p$  – obsazovací číslo fononu 0, 1, 2, ...

- Fonony jsou zodpovědné za měrné teplo (příspěvek elektronů je zanedbatelný).
- Příspěvek do sumačních pravidel je naopak zanedbatelný a je omezen příspěvkem od jader.

$$N_{\text{ph}} < N_n = \sum_n N_n \frac{(Z_n e h)^2}{8\pi \epsilon_0 m_n} \approx 2.74 \times 10^{-4} N_e \quad [\text{eV}^2]$$

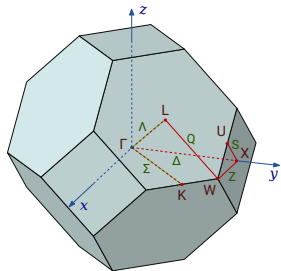
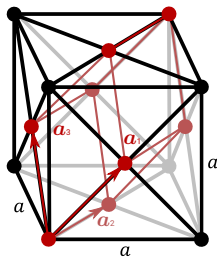
- V amorfních (neuspořádaných) látkách všechny fonony jsou **opticky aktivní** (více či méně), to znamená, že světlo EM pole si může vyměňovat energii se systémem (měnit obsazovací čísla fononů) každého fononu (vibrační módy jsou prakticky lokalizované a hybnost fononu není ostře definována).
- V krystalických látkách většina fononů jsou **opticky neaktivní**, to znamená, že světlo si nemůže vyměňovat energii se systémem na frekvenci těchto fononů. To se může stát z důvodu, že vlnový vektor světla nekoresponduje s vlnovým vektorem fononu, nebo je-li nulová pravděpodobnost excitace fononu (nulový maticový element).
- Ve skutečnosti všechny fonony jsou opticky aktivní skrze tzv. vícefononové excitace, kdy součet, nebo rozdíl vlnových vektorů fononů odpovídá vlnovému vektoru světla.
- Fonony, které mají nulový dipólový moment mají nenulový kvadrupólový moment (**Ramanův rozptyl**). To ale není lineární dielektrická odezva.

# Obsah

- 1 Vibrace atomové mříže – fonony
- 2 Plošně centrované kubické krystaly s 1–2 atomy na elementární buňku
- 3 Tři a více atomů v kubické mříži

## Plošně centrované kubické krystaly s 1–2 atomy na elementární buňku

fcc – face centered cubic

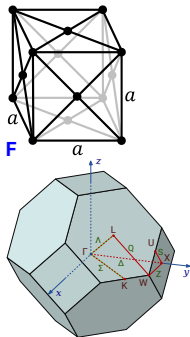
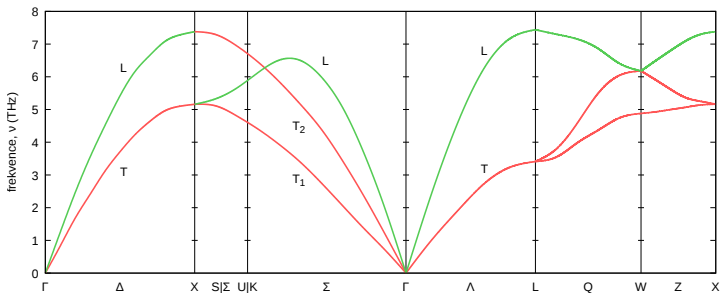


$$\mathbf{a}_j \mathbf{b}_k = 2\pi \delta_{jk}$$

- Vlastnosti krystalu závisí na tom kolik atomů obsahuje elementární buňka. Elementární buňka je definovaná Bravisovou mříží (třemi bázovými vektory  $\mathbf{a}_1 = a/2(1, 0, 1)$ ,  $\mathbf{a}_2 = a/2(1, 1, 0)$ ,  $\mathbf{a}_3 = a/2(0, 1, 1)$ )
- Díky translační symetrii vlnové vektory fononů patří v recipročném prostoru do první Brillouinovy zóny:  $\mathbf{b}_1 = 2\pi/a(1, -1, 1)$ ,  $\mathbf{b}_2 = 2\pi/a(1, 1, -1)$ ,  $\mathbf{b}_3 = 2\pi/a(-1, 1, 1)$ .
- Významné směry a body symetrie:  $\Gamma = (0, 0, 0)$ ,  $X = \pi/a(0, 2, 0)$ ,  $L = \pi/a(1, 1, 1)$ ,  $W = \pi/a(1, 2, 0)$ ,  $K = \pi/a(3/2, 3/2, 0)$ ,  $U = \pi/a(1/2, 2, 1/2)$ .

# Krystal mědi (Cu)

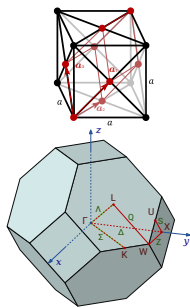
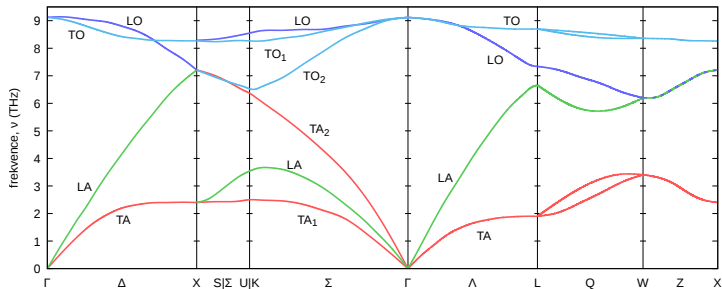
1 atom na elementární buňce (prostorová grupa  $Fm\bar{3}m$ )



- Frekvence fononů jsou jednotky THz, což odpovídá vlnovým délkám světla ve stovkách  $\mu\text{m}$ .
- Tedy vlnový vektor světla je velice blízko počátku  $\Gamma$  bodu.
- Všechny fononové větve začínají v počátku s nulovou energií (frekvencí).
- Žádné fonony nelze pozorovat, i kdyby měď byla dielektrikem a ne kovem (optické konstanty divergují pro  $\omega \rightarrow 0$ ).

# Krystal germánia (Ge)

2 stejné atomy na elementární buňku posunuté o  $a/4(1, 1, 1)$  –  
diamantová struktura (prostorová grupa  $Fd\bar{3}m$ )

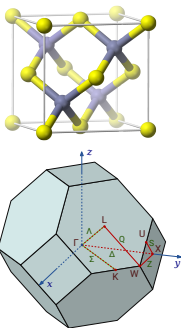
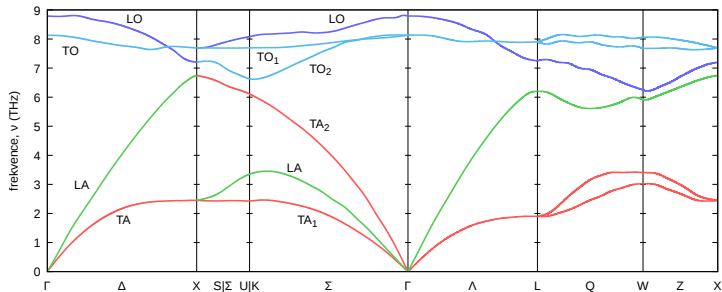


- Fonony mají šest větví, tři akustické a tři optické.
- Ve směrech největší symetrie transversální větve jsou degenerované.
- Optické větve začínají v bodě  $\Gamma$  na hodnotě cca 9 THz.
- Opticky aktivní TO fonony mohou interagovat se světlem, ale toto se v diamantové struktuře neděje, protože maticový element je v ideálním případě nulový.
- TO fonon je aktivní pouze v případě narušení symetrie, například příměsí.



# Krystal gálium arsenidu (GaAs)

2 různé atomy na elementární buňce posunutě o  $a/4(1, 1, 1)$  – zinkové blejno (prostorová grupa  $F\bar{4}3m$ )

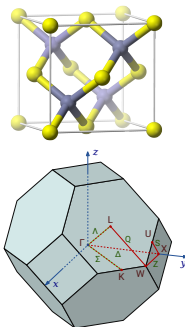
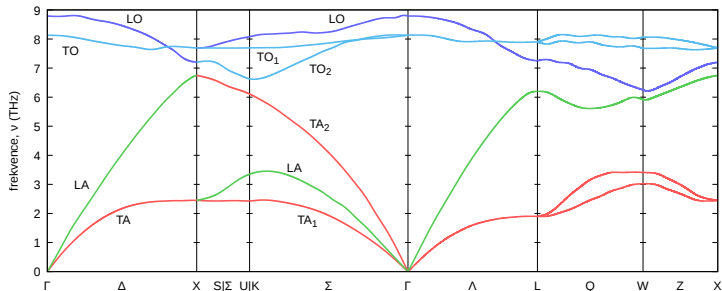


- Fonony mají velmi podobné spektrum jako v diamantové struktuře.
- Optické větve LO a TO nejsou degenerované v bodě  $\Gamma$ .
- TO fonony jsou opticky aktivní a lze použít model harmonického oscilátoru.

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_F^2 - \omega^2} = \frac{\omega_s^2 - \omega^2}{\omega_F^2 - \omega^2} \equiv \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \quad \omega_p^2 = \omega_s^2 - \omega_r^2 = \omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2$$

# Krystal gálium arsenidu (GaAs)

2 různé atomy na elementární buňku posunuté o  $a/4(1, 1, 1)$  –  
zinkové blejno (prostorová grupa  $F\bar{4}3m$ )



$$\hat{\epsilon}(\omega) = 1 + \hat{\beta} * [\delta(\omega_r - \omega) - \delta(\omega_r + \omega)] = 1 + \hat{\beta}(\omega_r - \omega) - \hat{\beta}(\omega_r + \omega)$$

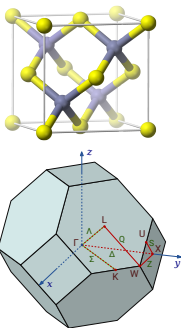
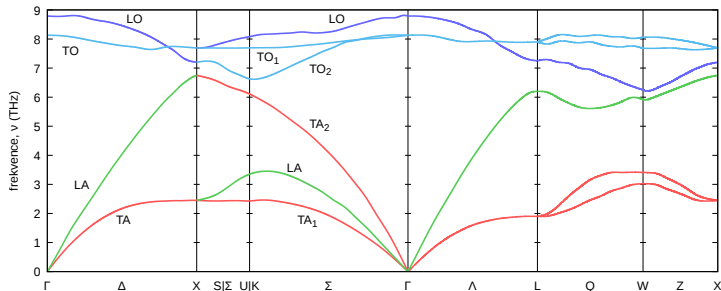
Lorenzova komplexní rozšiřovací funkce

$$\hat{\beta}(x) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{x + i\gamma/2}$$

vede ke klasickému Lorentzově modelu. Zahrnuje konečnou dobu excitace.

## Krystal gálium arsenidu (GaAs)

2 různé atomy na elementární buňce posunutě o  $a/4(1, 1, 1)$  – zinkové blejno (prostorová grupa  $F\bar{4}3m$ )



$$\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\beta} * [\delta(\omega_r - \omega) - \delta(\omega_r + \omega)] = 1 + \hat{\beta}(\omega_r - \omega) - \hat{\beta}(\omega_r + \omega)$$

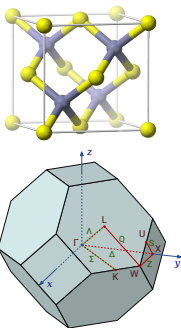
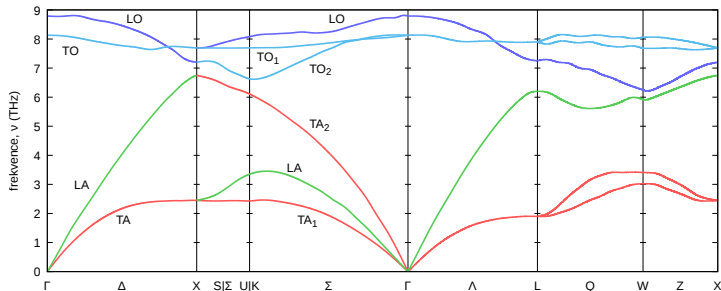
Gaussova komplexní rozšiřovací funkce

$$\hat{\beta}(x) = -\frac{\sqrt{2}}{\pi B} D\left(\frac{x}{\sqrt{2}B}\right) + i \frac{1}{\sqrt{2\pi}B} \exp\left(-\frac{x^2}{2B^2}\right) \quad D(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt$$

zahrnuje rozmazání hodnoty TO fononu.

# Krystal gálium arsenidu (GaAs)

2 různé atomy na elementární buňku posunuté o  $a/4(1, 1, 1)$  – zinkové blejno (prostorová grupa  $F\bar{4}3m$ )



$$\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\beta} * [\delta(\omega_r - \omega) - \delta(\omega_r + \omega)] = 1 + \hat{\beta}(\omega_r - \omega) - \hat{\beta}(\omega_r + \omega)$$

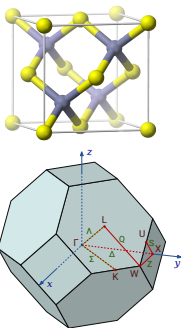
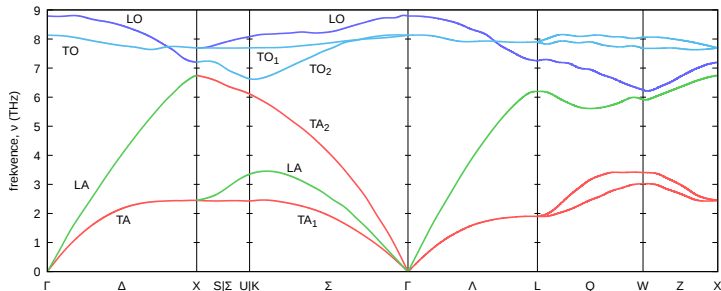
Ve skutečnosti se uplatňují oba rozšiřovací efekty. To vede ke konvoluci Lorenzovy a Gaussovy distribuční funkce

$$\hat{\beta}_{V,p} = \hat{\beta}_{G,p} * \beta_{L,p} = \hat{\beta}_{L,p} * \beta_{G,p}$$

kterému se říká Voigtova distribuční funkce.

## Krystal gálium arsenidu (GaAs)

2 různé atomy na elementární buňce posunuté o  $a/4(1, 1, 1)$  – zinkové blejno (prostorová grupa  $F\bar{4}3m$ )



$$\hat{\varepsilon}(\omega) = 1 + \hat{\beta} * [\delta(\omega_r - \omega) - \delta(\omega_r + \omega)] = 1 + \hat{\beta}(\omega_r - \omega) - \hat{\beta}(\omega_r + \omega)$$

Voigtovu komplexní rozšiřovací funkci lze spočítat pomocí Faddeevovy funkce

$$\hat{\beta}(x) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}B_{G,p}} W\left(\frac{x + iB_{L,p}/2}{\sqrt{2}B_{G,p}}\right) \quad W(\hat{z}) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{\hat{z} - t} dt$$

# Obsah

- 1 Vibrace atomové mříže – fonony
- 2 Plošně centrované kubické krystaly s 1–2 atomy na elementární buňku
- 3 Tři a více atomů v kubické mříži

## Tři a více atomů v kubické mříži

Sestavení klasických rovnic  $k$  částic:

$$\begin{aligned}
 -\mu_1\omega^2\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}) &= q_1\hat{\mathbf{E}}_1^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{c1}\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{d1}i\omega\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}), \\
 -\mu_2\omega^2\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}) &= q_2\hat{\mathbf{E}}_2^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{c2}\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{d2}i\omega\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}), \\
 &\vdots \\
 -\mu_m\omega^2\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}) &= q_m\hat{\mathbf{E}}_m^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{cm}\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{dm}i\omega\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}).
 \end{aligned}$$

- Problém se řeší v soustavě spojené s těžištěm. Redukované hmotnosti:

$$\mu_j = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k} \quad j = 1, 2, \dots, m \quad k = m + 1$$

- Nebude poslední částice chybět ve vyjádření susceptibility?

## Tři a více atomů v kubické mříži

Sestavení klasických rovnic  $k$  částic:

$$\begin{aligned}
 -\mu_1\omega^2\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}) &= q_1\hat{\mathbf{E}}_1^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{c1}\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{d1}i\omega\hat{\mathbf{x}}_1(\omega, \mathbf{k}), \\
 -\mu_2\omega^2\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}) &= q_2\hat{\mathbf{E}}_2^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{c2}\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{d2}i\omega\hat{\mathbf{x}}_2(\omega, \mathbf{k}), \\
 &\vdots \\
 -\mu_m\omega^2\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}) &= q_m\hat{\mathbf{E}}_m^{\text{loc}}(\omega, \mathbf{k}) - \kappa_{cm}\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}) + \kappa_{dm}i\omega\hat{\mathbf{x}}_m(\omega, \mathbf{k}).
 \end{aligned}$$

- Problém se řeší v soustavě spojené s těžištěm. Redukované hmotnosti:

$$\mu_j = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k} \quad j = 1, 2, \dots, m \quad k = m + 1$$

- Nebude poslední částice chybět ve vyjádření susceptibility? Pohyb poslední částice  $\hat{\mathbf{x}}_k(\omega, \mathbf{k})$  je lineární funkcí  $\hat{\mathbf{x}}_j(\omega, \mathbf{k})$  a díky redukovaným hmotnostem to na řešení vliv nemá.
- Zásadní je volba lokálního pole ve vztahu ke střednímu poli  $\hat{\mathbf{E}}(\omega, \mathbf{k})$ . Když lokální pole nahradíme středním polem, tak se jedná o soustavu nezávislých oscilátorů.



- Abychom lokální pole mohli nahradit výsledným koherentním polem, musíme do rovnic zavést vzájemnou interakci jednotlivých částic, která vyjadřuje příspěvek od nejbližšího okolí do koherentní části pole v místě částice (pro jednoduchost pro tři částice):

$$-\mu_1\omega^2\hat{x}_1(\omega, \hat{\mathbf{k}}) = q_1\hat{E}(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \kappa_{c1}\hat{x}_1(\omega, \hat{\mathbf{k}}) + \kappa_{d1}i\omega\hat{x}_1(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \kappa_{c12}[\hat{x}_2(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \hat{x}_1(\omega, \hat{\mathbf{k}})]$$

$$-\mu_2\omega^2\hat{x}_2(\omega, \hat{\mathbf{k}}) = q_2\hat{E}(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \kappa_{c2}\hat{x}_2(\omega, \hat{\mathbf{k}}) + \kappa_{d2}i\omega\hat{x}_2(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \kappa_{c12}[\hat{x}_1(\omega, \hat{\mathbf{k}}) - \hat{x}_2(\omega, \hat{\mathbf{k}})]$$

- Povšimněme si, že v rovnicích zůstal i člen, který závisí pouze na poloze. Tento člen zajišťuje splnění zákona zachování hybnosti díky tomu, že systém popisujeme v soustavě spojené s těžištěm.
- Řešení těchto lineárních rovnic vede na maticový formalismus:

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \omega_{\text{p}}^{\text{T}}[\mathbf{S} - \omega^2\mathbf{I} - i\omega\mathbf{D}]^{-1}\omega_{\text{p}}$$

$$\omega_{\text{p}}^{\text{T}} = (\omega_{\text{p}1}, \omega_{\text{p}2}, \dots, \omega_{\text{p}m})$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} & \cdots & \eta_{1m} \\ \eta_{12} & \eta_{22} & \cdots & \eta_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \eta_{1m} & \eta_{2m} & \cdots & \eta_{mm} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_m \end{pmatrix}.$$

$$\omega_{\text{pj}} = \frac{\mathcal{N}_a q_j^2}{\epsilon_0 \mu_j} \quad \eta_{ij} = \frac{1}{\mu_j} \left( \kappa_{c,j} - \sum_{k=1}^m \kappa_{cjk} \right)$$

$$\eta_{jk} = \frac{\kappa_{cjk}}{\sqrt{\mu_j \mu_k}} \quad \gamma_j = \frac{\kappa_{dj}}{\mu_j}$$

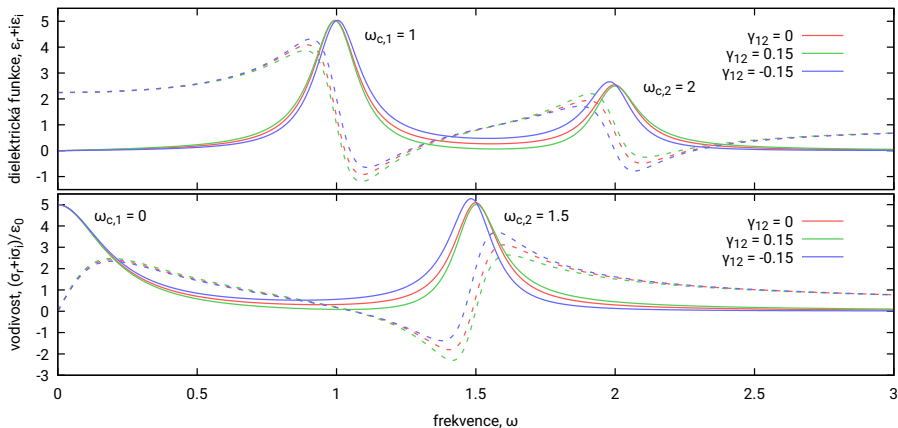
- Rovnice lze transformovat pomocí ortogonální transformace  $\mathbf{u}$  do zobecněných souřadnic tak, aby matice  $\mathbf{S}$ , která má jednotku frekvence na druhou, reprezentovala centrální frekvence jednotlivých vibračních módů:

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \omega_{\text{p}}^{\text{T}} \mathbf{u}^{\text{T}} [\mathbf{u} \mathbf{S} \mathbf{u}^{\text{T}} - \omega^2 \mathbf{I} - i\omega \mathbf{u} \mathbf{D} \mathbf{u}^{\text{T}}]^{-1} \mathbf{u} \omega_{\text{p}} = \omega_{\text{p}}^{\text{T}} \mathbf{u}^{\text{T}} [\mathbf{C} - \omega^2 \mathbf{I} - i\omega \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{u} \omega_{\text{p}}$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \omega_{\text{c}1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_{\text{c}2}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \omega_{\text{c}m}^2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1m} \\ \gamma_{12} & \gamma_{22} & \cdots & \gamma_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{1m} & \gamma_{2m} & \cdots & \gamma_{mm} \end{pmatrix}$$

- Je nutné si uvědomit, že transformací jsme transformovali i plazmové frekvence. Ortogonální transformace nemění velikost vektoru, takže lze psát:

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \omega_{\text{p}}^{\text{T}} [\mathbf{C} - \omega^2 \mathbf{I} - i\omega \mathbf{G}]^{-1} \omega_{\text{p}}$$



$$\omega_{p1} = \omega_{p2} = 1 \quad \gamma_{11} = \gamma_{22} = 0.2$$

- Tento model je pouze Lorentzovsky rozšířený.
- Jak tento model zobecnit, tak aby obsahoval i Gaussovskou komponentu rozšíření?

- Formálně jednoduché řešení:

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \int_{mD} \left\{ \boldsymbol{\omega}_p^T [\mathbf{C} - \omega^2 \mathbf{I} - i\omega \mathbf{G}]^{-1} \boldsymbol{\omega}_p \right\} w(\boldsymbol{\omega}_c) d\boldsymbol{\omega}_c$$

kde  $w(\boldsymbol{\omega}_c)$  je Gaussovské rozdělení centrálních frekvencí. Není snadné je spočítat.

- Lze použít následující aproximace:

1

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \frac{1}{C_N} \sum_p \left( N_p + iM_p \frac{E}{E_p} \right) \frac{1}{E_p} \hat{\beta}_p * [\delta(E - E_p) - \delta(E + E_p)]$$

kde

$$\sum_p \frac{M_p}{E_p} = 0 \qquad C_N = \frac{1}{\sum_p N_p} \sum_p \left( N_p + \frac{M_p B_{L,p}}{E_p} \right)$$

Tato aproximace je vhodná pro **dielektrika**. Vyžaduje alespoň dva fonony, tak aby byla splněna první podmínka. Parametr  $M_p$  přispívá Lorentzovskou částí do sumačního pravidla.

2

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(E) = \sum_p \left( N_p + iM_p \frac{E_p}{E} \right) \frac{1}{E_p} \hat{\beta}_p * [\delta(E - E_p) - \delta(E + E_p)]$$

Tato aproximace je vhodná pro **vodiče**. Může popsat **Fano rezonanci** fononu s volnými nositeli náboje ve vodivém materiálu. Parametr  $M_p$  mění hodnotu statické vodivosti.

Obě aproximace mohou nekontrolovaně dávat nefyzikální odezovou funkci, když  $M_p$  jsou příliš velká.

- Ve tří dimenzionálním prostoru bychom správně měli psát:

$$\hat{\chi}_{\text{ph}}(\omega) = \boldsymbol{\omega}_p^T [\mathbf{C} - \omega^2 \mathbf{I} - i\omega \mathbf{G}]^{-1} \boldsymbol{\omega}_p$$

$$\boldsymbol{\omega}_p^T = \begin{pmatrix} \omega_{p,1} & 0 & 0 & \omega_{p,2} & 0 & 0 & \cdots & \omega_{p,m} & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{p,1} & 0 & 0 & \omega_{p,2} & 0 & \cdots & 0 & \omega_{p,m} & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{p,1} & 0 & 0 & \omega_{p,2} & \cdots & 0 & 0 & \omega_{p,m} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \omega_{c,1}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{c,1}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{c,1}^2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_{c,2}^2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_{c,2}^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_{c,2}^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \omega_{c,m}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \omega_{c,m}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \omega_{c,m}^2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 & 0 & \cdots & \gamma_{1m} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{1m} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & \cdots & 0 & 0 & \gamma_{1m} \\ \gamma_{12} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 & 0 & \cdots & \gamma_{2m} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{12} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{2m} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 & 0 & \gamma_{22} & \cdots & 0 & 0 & \gamma_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{1m} & 0 & 0 & \gamma_{2m} & 0 & 0 & \cdots & \gamma_{mm} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{1m} & 0 & \gamma_{2m} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \gamma_{mm} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{1m} & 0 & 0 & \gamma_{2m} & \cdots & 0 & 0 & \gamma_{mm} \end{pmatrix}$$

- Všechny matice jsou potom invariantní vůči libovolné rotaci (ortogonální transformaci v 3D prostoru.
- V případě **opticky neaktivního prostředí** je možné matice redukovat tak, že 3D matice přepíšeme na 1D skaláry a jednotkovou 3D matici.
- V případě **opticky aktivního prostředí** je nutné předefinovat matici  $\hat{C}$  jako komplexní Hermiteovskou matici následovně:

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} (\mathbf{1} + i\nu_{11} \star \boldsymbol{\nu})\omega_{c,1}^2 & i\nu_{12} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,1}\omega_{c,2} & \cdots & i\nu_{1m} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,1}\omega_{c,m} \\ -i\nu_{12} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,1}\omega_{c,2} & (\mathbf{1} + i\nu_{22} \star \boldsymbol{\nu})\omega_{c,2}^2 & \cdots & i\nu_{2m} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,2}\omega_{c,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -i\nu_{1m} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,1}\omega_{c,m} & -i\nu_{2m} \star \boldsymbol{\nu}\omega_{c,2}\omega_{c,m} & \cdots & (\mathbf{1} + i\nu_{mm} \star \boldsymbol{\nu})\omega_{c,m}^2 \end{pmatrix}$$

kde  $\star \boldsymbol{\nu}$  je Hodgeův hvězdičkový operátor

$$\star \boldsymbol{\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \nu_z & -\nu_y \\ -\nu_z & 0 & \nu_x \\ \nu_y & -\nu_x & 0 \end{pmatrix}.$$