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

Daniel Franta

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

21. 2. 2022

Obsah

Úvod – Disperzní modely

- V homogenním hmotném prostředí se podobně jako ve vakuu šíří **rovinné harmonické vlny**. Na rozdíl od vakua, tyto vlny jsou tlumené, protože amplituda podél směru šíření vlny klesá díky rozptylovým (absopčním) ztrátám:

$$\boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r}) = E_0\, \Re\left(\hat{\boldsymbol{p}}_\nu\ \exp[\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{k}}_\nu \boldsymbol{r} - \mathrm{i}\omega_0 t]\right)$$

  - $\boldsymbol{E}(t,\boldsymbol{r})$ – vektorové pole elektrické intenzity
  - E_0 – amplituda vlny
  - $\hat{\boldsymbol{p}}_\nu$ – polarizační vektor
  - $\hat{\boldsymbol{k}}_\nu$ – vlnový vektor
  - ω_0 – frekvence

- V prostředí se mohou šířit homogenní vlny

$$\hat{\boldsymbol{k}}_\nu = \frac{\omega_0}{c}(n + \mathrm{i}k)\boldsymbol{\nu} = \frac{\omega_0}{c}\hat{n}\boldsymbol{\nu}$$

  či nehomogenní vlny

$$\hat{\boldsymbol{k}}_\nu = \frac{\omega_0}{c}(n\boldsymbol{\nu} + \mathrm{i}k\boldsymbol{\kappa}) = \boldsymbol{k}_{\nu,\mathrm{r}} + \mathrm{i}\boldsymbol{k}_{\nu,\mathrm{i}}$$

  - n, k – optické konstanty

Úvod – Disperzní modely

- **Optické konstanty** lze zjistit na základě řešení tzv. makroskopických Maxwellových (vlnových) rovnic.
- Optické kostanty závisí na ω_0, $\boldsymbol{\nu}$, $\boldsymbol{\kappa}$, $\nu = 1, 2$ a jsou dány v optickém oboru tzv. **dielektrickou odezvou** hmotného prostředí. V nejjednoduším případě závisí pouze na frekvenci a proto se někdy používá pojem **optické funkce** $\hat{n}(\omega)$.
- **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.

Úvod – Disperzní modely

Může být reprezentována různými veličinami:

- susceptibilita: $\hat{\chi}(\omega)$ nebo $\chi(t)$ (nejpřirozeněji popisuje reakci nabitých částic na vnější harmonické pole, pulz – $\chi(t)$ je Greenova funkce, vztah mezi polarizací $\boldsymbol{P}$ a elektrickým polem $\boldsymbol{E}$)
- 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)
- optická vodivost: $\hat{\sigma}(\omega) = -\mathrm{i}\epsilon_0\omega\hat{\chi}(\omega)$ (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.

Ve skutečnosti dielektrická odezva může záviset i na vlnovém vektoru $\hat{\boldsymbol{k}}_\nu$ (prostorová disperze) a v anizotropním prostředí na vektoru polarizace $\hat{\boldsymbol{p}}_\nu$, proto většina zmiňovaných funkcí jsou tenzory.

Úvod – Disperzní modely

Funkce dielektrická odezvy nemohou být zcela libovolné. Dielektrická odezva popsaná disperzními modely musí splňovat tři základní podmínky.

Pro **nevodivé izotropní prostředí bez prostorové disperze (optické aktivity)** lze psát tyto podmínky následovně:

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

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

2. **Kramers–Kronigovy relace (Hilbertova transformace):**

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

$\fint$ Cauchyho vlastní hodnota

3. **Sumační pravidla (f-sum rule):**

$$\int_0^\infty \omega\, \chi_\mathrm{i}(\omega)\, \mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\omega_\mathrm{p}^2 = \frac{\pi}{2}\frac{\sigma(0)}{\epsilon_0} \qquad \int_0^\infty \chi_\mathrm{r}(\omega)\, \mathrm{d}\omega = -\frac{\pi}{2}\frac{\sigma_\mathrm{r}(0)}{\epsilon_0}$$

Konstanta ω_p se nazývaná **plazmová frekvence**: $\omega_\mathrm{p}^2 \approx \frac{e^2 \mathcal{N}_\mathrm{e}}{\epsilon_0 m_\mathrm{e}}$
Tato konstanta je přibližně úměrná hustotě elektronů $\mathcal{N}_\mathrm{e}$.

Úvod – Disperzní modely

Ve vodivých prostředích nebo v prostředích s anizotropií či prostorovou disperzí je nutné tyto podmínky psát obecněji

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

$$\hat{\chi}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \hat{\chi}^*(-\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \qquad \text{nebo} \qquad \hat{\chi}(\omega, \hat{\boldsymbol{k}}) = \hat{\chi}^*(-\omega, -\hat{\boldsymbol{k}}^*)$$

2. **Kramers–Kronigovy relace:**

$$\hat{\chi}_\mathrm{r}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}_\mathrm{i}(\xi, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})}{\xi - \omega} \,\mathrm{d}\xi\,, \qquad \hat{\chi}_\mathrm{i}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}_\mathrm{r}(\xi, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})}{\xi - \omega} \,\mathrm{d}\xi + \frac{\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{r}(0, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})}{\epsilon_0 \omega}$$

3. **Sumační pravidla:**

$$\int_0^{\infty} \hat{\chi}_\mathrm{i}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) - \hat{\chi}_\mathrm{i}(\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \,\mathrm{d}\omega = \mathbf{0}$$

$$\int_0^{\infty} \omega \left[\hat{\chi}_\mathrm{i}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) + \hat{\chi}_\mathrm{i}(\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r})\right] \,\mathrm{d}\omega = \pi \omega_\mathrm{p}^2 \,\mathbf{1} = \pi \frac{\sigma(0)}{\epsilon_0} \,\mathbf{1}$$

$$\int_0^{\infty} \hat{\chi}_\mathrm{r}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) + \hat{\chi}_\mathrm{r}(\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r}) \,\mathrm{d}\omega = -\pi \frac{\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{r}(0, \boldsymbol{k}_\mathrm{r})}{\epsilon_0}$$

$$\int_0^{\infty} \omega [\hat{\chi}_\mathrm{r}(\omega, \boldsymbol{k}_\mathrm{r}) - \hat{\chi}_\mathrm{r}(\omega, -\boldsymbol{k}_\mathrm{r})] \,\mathrm{d}\omega = \mathbf{0}$$

Obsah

Lineární dielektrická odezva

Základem teorie lineární dielektrické odezvy jsou takzvané **makroskopické Maxwellovy rovnice**. V časoprostorových souřadnicích se dají tyto rovnice napsat následovně:

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

Tyto rovnice v rámci elektrostatiky (pole se mění s časem velmi pomalu) lze doplnit materiálovými (konstitutivními) rovnicemi ve tvaru:

$$\boldsymbol{D} = \epsilon_0\, \varepsilon_\mathrm{r}\, \boldsymbol{E} \qquad \boldsymbol{B} = \mu_0\, \mu_\mathrm{r}\, \boldsymbol{H}$$

Často v učebnicích tyto nesouvisející rovnice jsou mylně považovány za základ teorie disperze, kdy se druhá MMR doplní o vnitřní proudy a ohmův zákon (viz. například Soubusta–Černoch, Optické vlastnosti pevných látek, Olomouc 2017).

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{H} = \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} + \boldsymbol{j} \qquad \boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$$

Tím se odvodí takzvané **telegrafní rovnice**

$$\ddot{\boldsymbol{E}} + \frac{\sigma}{\epsilon}\dot{\boldsymbol{E}} - \frac{1}{\epsilon\mu}\triangle \boldsymbol{E} = 0$$

které s teorií disperze mají pramálo společného, ačkoliv jsou to vlnové rovnice, které v teorii lineární odezvy hrající klíčovou roli.

Lineární dielektrická odezva

Maxwellovy rovnice ve vakuu

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

Vlnová rovnice

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

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

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

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

$\boldsymbol{\nu}$ směrový vektor

Lineární dielektrická odezva

Mikroskopické Maxwellovy rovnice

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \qquad \mathrm{rot}\,\boldsymbol{B} = \mu_0 \left(\epsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \boldsymbol{j} \right) \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{B} = 0$$

- $\rho(t, \boldsymbol{r})$ hustota náboje
- $\boldsymbol{j}(t, \boldsymbol{r})$ hustota elektrického proudu

Rovnice kontinuity

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Rigorózní řešení je velmi komplikované a zahrnuje všechny efekty interakce světla (elektromagnetického pole) s nabitými částicemi v hmotném prostředí.

Makroskopické Maxwellovy rovnice zapsané pomocí pomocných polí $\boldsymbol{D}$ a $\boldsymbol{H}$

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

$$\boldsymbol{D} = \epsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} \qquad \text{a} \qquad \boldsymbol{B} = \mu_0 \left(\boldsymbol{H} + \boldsymbol{M} \right)$$

- $\boldsymbol{P}$ vektorové pole polarizace
- $\boldsymbol{M}$ vektorové pole magnetizace

Lineární dielektrická odezva

- Jelikož EM pole je aditivní, řešení odezvy můžeme rozdělit na jednotlivé efekty a zavést jisté omezující předpoklady pro pomocná pole.
- Při středování polí se omezíme na tzv. **Lineární dielektrickou odezvu**.

Kvazineutralita 3MR + 1KR

$$\langle \rho \rangle = \operatorname{div} \boldsymbol{P} = 0$$

Předpokládáme, že kladné náboje se zrychlují ve směru pole a záporné proti směru pole, ale nikde se neshromažďují kladné či záporné náboje.

Pro optické frekvence zanedbáme magnetizaci 2MR + 1KR + 2KR

$$\langle \boldsymbol{j} \rangle = \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} + \operatorname{rot} \boldsymbol{M} \approx \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}$$

Navíc zavedeme lineární vztah mezi poli $\boldsymbol{P}$ a $\boldsymbol{E}$ následovně:

$$\boldsymbol{P}(t, \boldsymbol{r}) = \epsilon_0 \iiiint_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\chi}(t - \tau, \boldsymbol{r} - \boldsymbol{\rho})\, \boldsymbol{E}(\tau, \boldsymbol{\rho})\, \mathrm{d}^3 \boldsymbol{\rho}\, \mathrm{d}\tau$$

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:

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

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

- FT lze provést pouze na konečném prostoru pokud je řešením tlumená harmonická vlna.
- Za určitých omezujících předpokladů lze provést analytické rozšíření $\boldsymbol{k}_\mathrm{r} \to \hat{\boldsymbol{k}}$. Ovšem v tomto případě nalézt použitelný disperzní model je velmi složité (nemožné) a proto je nutné modely definovat neanalyticky.

Obsah

Lokální lineární dielektrická odezva

Těžkostí s integrací přes prostorové souřadnice lze obejít, když si definujeme **lokální lineární dielektrickou odezvu**.

$$\boldsymbol{P}(t,\boldsymbol{r}) = \epsilon_0 \iiiint \boldsymbol{\chi}(t,\tau,\boldsymbol{r},\boldsymbol{\rho})\,\boldsymbol{E}(\tau,\boldsymbol{\rho})\,\mathrm{d}\tau\mathrm{d}^3\boldsymbol{\rho}$$

Tři předpoklady:

1. Lokálnost – zrušíme integraci přes okolní body $\boldsymbol{\rho}$: $\boldsymbol{\chi}(t,\tau,\boldsymbol{r},\boldsymbol{\rho}) = \boldsymbol{\chi}(t,\tau)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\rho})$
2. Kauzalita – $\boldsymbol{\chi}(t,\tau) = 0$ 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:

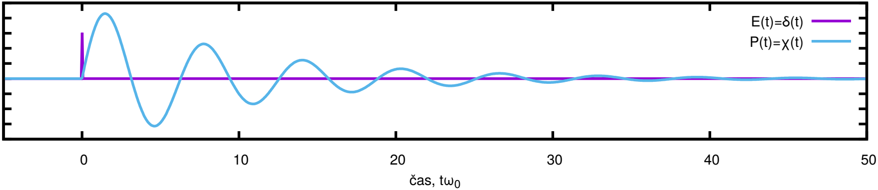
$$\boldsymbol{P}(t) = \epsilon_0 \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau)\,\boldsymbol{E}(\tau)\,\mathrm{d}\tau \qquad \overset{\mathrm{FT}}{\Longleftrightarrow} \qquad \hat{\boldsymbol{P}}(\omega) = \epsilon_0 \hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega)\,\hat{\boldsymbol{E}}(\omega)$$

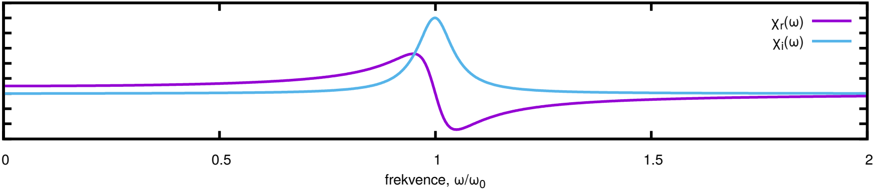
$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\omega) = \int \boldsymbol{\chi}(t-\tau)\exp\left[\mathrm{i}\omega(t-\tau)\right]\,\mathrm{d}t$$

Funkce $\boldsymbol{\chi}(t)$ je **Greenova funkce**.

Lokální lineární 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)





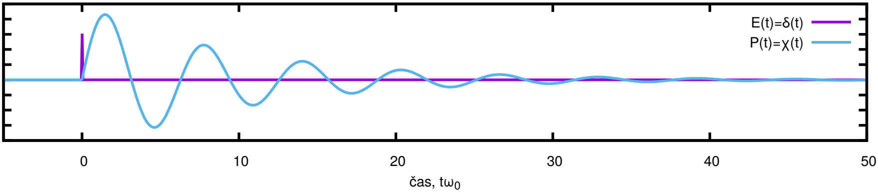
$$E(t) \sim \delta(t) \qquad P(t) \sim \sin(\omega_0 t)\exp(-t/\tau_0)\,\Theta(t) \qquad \hat{\chi}(\omega) \sim \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\omega/\tau_0} \qquad \tau_0\omega_0 = 10$$

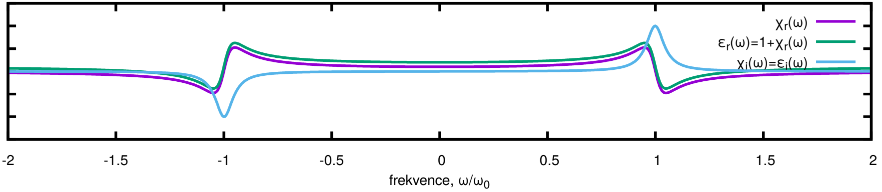
Obsah

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?

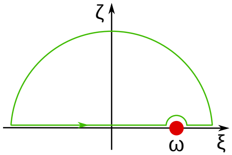
Obsah

Kramers–Kronigovy relace

Analytické rozšíření:

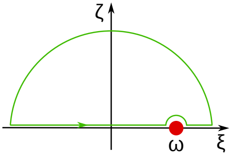
$$\omega \to \hat{\omega} = \xi + \mathrm{i}\zeta \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega}) = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\chi}(t-\tau) \exp\left[\mathrm{i}\xi(t-\tau)\right] \exp\left[-\zeta(t-\tau)\right] \mathrm{d}t$$

- V případě nevodivých materiálů platí, že $\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})$ je analytická funkce, omezená pro $\zeta \geq 0$, protože $\chi(t) = 0$ pro $t < 0$.
- V případě vodivých materiálů toto neplatí a je nutno postupovat trochu odlišně. Výsledné KK relace jsou poněkud odlišné.
- Tedy výsledky zde prezentované budou platit pouze pro materiály s vázanými náboji (dielektrika).
- Pro $\zeta \geq 0$ je i funkce $\frac{\hat{\boldsymbol{\chi}}(\hat{\omega})}{\hat{\omega}-\omega}$ analytická s výjimkou bodu $\hat{\omega} = \omega + \mathrm{i}0$.



Kramers–Kronigovy relace

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



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

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

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

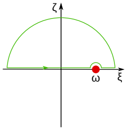
$$\chi_{\mathrm{i}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{\mathrm{r}}(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi$$

Když využijeme časově reverzní symetrie, tak můžeme integraci přes celý obor ξ převést na integraci pouze přes kladné frekvence.

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

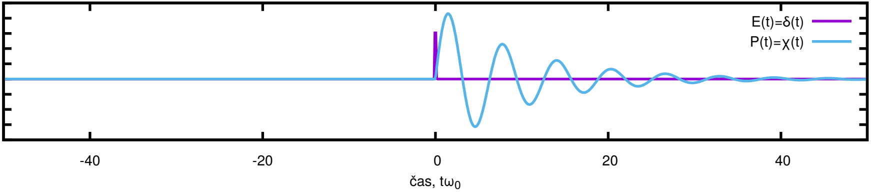
Tato forma je zajímavá, protože se integruje funkce $\xi\chi_{\mathrm{i}}(\xi)$, která reprezentuje sílu přechodů úměrnou hustotě nabitých částic v systému, přes kladný rozsah s fyzikálním významem odpovídající excitační energii.

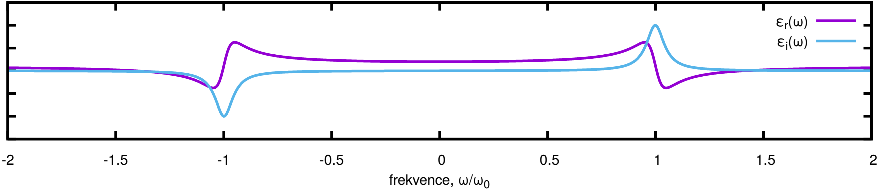
Kramers–Kronigovy relace



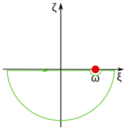
$$\chi(t) \sim \sin(\omega_0 t)\exp(-t/\tau_0)\,\Theta(t)$$ retardovaná Greenova funkce

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



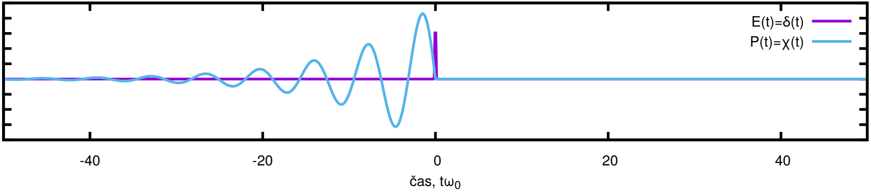


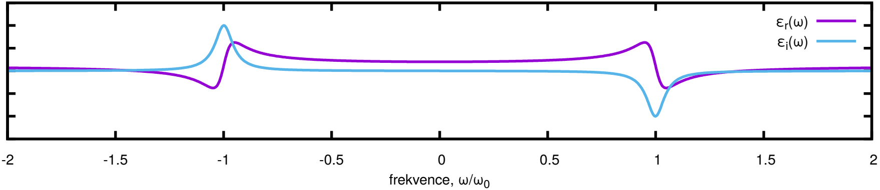
Kramers–Kronigovy relace



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

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





Obsah

Sumační pravidlo

Pro odvození sumačních pravidel je důležitý **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 $f(x) \to \xi\chi_{\mathrm{i}}(\xi)$ a $g(y) \to \chi_{\mathrm{r}}(\omega)$ tak Kramers–Kronigovy relace a teorém superkonvergence vedou:

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

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:

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

Shrnutí tří základních podmínek

- Časově reverzní symetrie – tato základní podmínka je čistě matematická a univerzální (není ji možné žádným způsobem fyzikálně spochybnit).
- Tady prezentované Kramers–Kronigovy relace nezahrnují vodivé materiály a zanedbávají prostorovou disperzi. Kramers–Kronigovy relace zahrnující vodivost a prostorovou disperzi (optickou aktivitu) jsou podobné, ale trochu složitější.
- Kramers–Kronigovy relace jsou založené na kauzalitě a bez popření kauzality není možné je zpochybnit. často se nezprávně zpochybňují, například v případě prostorové disperze.
- Mnohem větší problémy nastanou při ověřování platnosti sumačních pravidel, které kromě matematického základu vychází z pohybových rovnic, protože platí pouze jako celek, tedy je nutné integrovat i do rentgenové oblasti spektra do vyšších energií. U těžších atomů je nutné provést relativistické korekce.
- Přes všechny problémy s platností sumačních pravidel v rentgenové oblasti, v našich disperzních modelech předpokládáme platnost všech třech základních podmínek pro dielektrickou odezvu. **Nazýváme je fundamentálními**.