

Лекция 2
Тензоры оптического отклика

О тензорах просто

тензоры для нас — обобщение коэффициентов
линейной и нелинейной связи на многомерный случай

линейная зависимость

$$y = k^{(1)} x$$

$$Y_i = \sum_j K_{ij}^{(1)} X_j \equiv K_{ij}^{(1)} X_j$$

$K_{ij}^{(1)}$ — тензор второго ранга
(матрица $N \times N$)

билинейная зависимость

$$y = k^{(2)} x_1 x_2$$

$$Y_i = \sum_j \sum_m K_{ijm}^{(2)} X_{1j} X_{2m} \equiv K_{ijm}^{(2)} X_{1j} X_{2m}$$

$K_{ijm}^{(2)}$ — тензор третьего ранга
(матрица $N \times N \times N$)

и так далее...

О тензорах просто

тензоры для нас — обобщение коэффициентов
линейной и нелинейной связи на многомерный случай

линейная зависимость

$$Y_i = \sum_j K_{ij}^{(1)} X_j \equiv K_{ij}^{(1)} X_j$$

при смене систем координат компоненты тензоров
преобразуются по четко определенным правилам линейной алгебры

обычный вектор — частный случай тензора первого ранга

билинейная зависимость

$$y = k^{(2)} x_1 x_2$$

$$Y_i = \sum_j \sum_m K_{ijm}^{(2)} X_{1j} X_{2m} \equiv K_{ijm}^{(2)} X_{1j} X_{2m}$$

$K_{ijm}^{(2)}$ — тензор третьего ранга
(матрица $N \times N \times N$)

и так далее...

Спектральный метод: линейный отклик

здесь учитывается тензорность и пространственная с частотной дисперсии

- Разложим быстрое электрическое поле в (ω, \mathbf{k}) -интеграл Фурье:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) = \int \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} d\omega d\mathbf{k}$$

- Подставим в общее выражение для линейной части вектора поляризации:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) = \int_0^{\infty} d\tau_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{R}_1 \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1, \tau_1) \cdot \int \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} e^{i\omega \tau_1 - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1)} d\omega d\mathbf{k}$$

- Перегруппируем (τ, \mathbf{R}) - и (ω, \mathbf{k}) -интегралы:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) = \int \left[\int_0^{\infty} d\tau_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{R}_1 \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1, \tau_1) e^{i\omega \tau_1 - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1)} \right] \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} d\omega d\mathbf{k}$$

от свертки — к произведению

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) = \int \chi^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} d\omega d\mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{P}(\omega, \mathbf{k}) = \chi^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$$

Спектральный метод: нелинейный отклик

с нелинейной поляризацией действуем аналогично

- Общее выражение для квадратичной части вектора поляризации:

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(2)}(\mathbf{R}, t) = \iint d\omega_1 d\mathbf{k}_1 d\omega_2 d\mathbf{k}_2 \chi^{(2)}(\omega_1, \mathbf{k}_1, \omega_2, \mathbf{k}_2) : \mathbf{E}(\omega_1, \mathbf{k}_1) \mathbf{E}(\omega_2, \mathbf{k}_2) e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t + i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}}$$

$$\text{где } \chi^{(2)}(\omega_1, \mathbf{k}_1, \omega_2, \mathbf{k}_2) = \int_0^\infty \int_0^\infty d\tau_1 d\tau_2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \chi^{(2)}(\mathbf{R}_1, \tau_1, \mathbf{R}_2, \tau_2) e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_1) - i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_2)}$$

- Общее выражение для кубической части вектора поляризации:

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(3)}(\mathbf{R}, t) = \iiint d\vec{\omega}_{1..3} d\vec{\mathbf{k}}_{1..3} \chi^{(3)}(\vec{\omega}_{1..3}, \vec{\mathbf{k}}_{1..3}) : \mathbf{E}(\omega_1, \mathbf{k}_1) \mathbf{E}(\omega_2, \mathbf{k}_2) \mathbf{E}(\omega_3, \mathbf{k}_3) e^{\dots \text{по аналогии} \dots}$$

$$\text{где } \chi^{(3)}(\vec{\omega}_{1..3}, \vec{\mathbf{k}}_{1..3}) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty d\vec{\tau}_{1..3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{\mathbf{R}}_{1..3} \chi^{(3)}(\vec{\mathbf{R}}_{1..3}, \vec{\tau}_{1..3}) e^{\dots \text{по аналогии} \dots}$$

спектральный метод вводит тензоры отклика $\chi^{(N)}(\vec{\omega}_{1..N}, \vec{\mathbf{k}}_{1..N})$
но для дальнейших вычислений все еще слишком абстрактен

Пространственная дисперсия

здесь для простоты — без частотной, и только линейный отклик

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1) \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1, t) d\mathbf{R}_1 - \text{вклад в } \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) \text{ дает поле } \tilde{\mathbf{E}} \text{ в окрестности точки } \mathbf{R}$$

- Как правило, масштаб пространственной нелокальности (10 – 50 нм) много меньше длины световой волны (380 – 700 нм). Разложим $\tilde{\mathbf{E}}$ в «пространственный» ряд Тейлора:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1, t) \approx \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) - x_{1i} \partial_i \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) + \frac{1}{2} x_{1i} x_{1j} \partial_i \partial_j \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) + \dots$$

- После постановки в выражение для $\tilde{\mathbf{P}}$, получим:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) \approx \chi^{(1)} \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) + \gamma^{(1)} : \nabla \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) + \mu^{(1)} : (\nabla \otimes \nabla) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t) + \dots$$

$$\chi^{(1)} = \int_{\mathbb{R}^3} \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1) d\mathbf{R}_1, \quad \gamma^{(1)} = - \int_{\mathbb{R}^3} \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1) \otimes \mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_1, \quad \mu^{(1)} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \chi^{(1)}(\mathbf{R}_1) \otimes \mathbf{R}_1 \otimes \mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_1$$

поляризация зависит и от компонент поля, и от их пространственных производных из-за этого ранг тензоров, описывающих пространственную дисперсию, увеличивается

Частотная дисперсия

здесь для простоты — без пространственной, и только линейный отклик

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) = \int_0^{\infty} \chi^{(1)}(\tau_1) \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t - \tau_1) d\tau_1 \text{ — вклад в } \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) \text{ дает и поле } \tilde{\mathbf{E}} \text{ в недалеком прошлом}$$

- Как правило, период колебаний поля (10^{-15} с) много меньше характерного времени отклика среды ($10^{-10} - 10^{-8}$ с). Поэтому во «временной» ряд Тейлора разложим медленную \mathcal{E}

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}, t - \tau_1) \approx \exp^{-i\omega_0 t} \left(\mathcal{E} e^{i\omega_0 \tau_1} + \sum_{m=1}^N e^{i\omega_0 \tau_1} \frac{(-\tau_1)^m}{m!} \frac{\partial^m \mathcal{E}}{\partial t^m} \right) + c.c.$$

- После постановки в выражение для $\tilde{\mathbf{P}}$, получим:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{R}, t) \approx \left(\chi^{(1)}(\omega_0) \cdot \mathcal{E}(\mathbf{R}, t) + \sum_{m=1}^N \frac{i^m}{m!} \frac{\partial^m \chi^{(1)}}{\partial \omega^m} \cdot \frac{\partial^m \mathcal{E}}{\partial t^m} \right) e^{-i\omega_0 t} + c.c.$$

$$\chi^{(1)}(\omega) = \int_0^{\infty} \chi^{(1)}(\tau_1) e^{i\omega \tau_1} d\tau_1 \text{ (à la фурье-образ функции отклика)}$$

Симметрия тензоров отклика

внешняя симметрия

Любые комбинации поворотов и отражений, относительно которых среда инвариантна, не меняют координатных представлений тензоров отклика среды. Это ограничивает число независимых компонент тензоров отклика

Существуют специальные таблицы, позволяющие узнать общий вид тензора в среде с определенной симметрией, но только в системах координат, привязанных к осям/плоскостям симметрии

ПРИМЕР: в средах с центром инверсии все тензоры нечетных рангов нулевые

внутренняя симметрия

Перестановка частотных аргументов вместе с перестановкой соответствующих индексов не изменяет вид тензора отклика (т.е. все равно в каком порядке перемножать поля):

ПРИМЕР: $\chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2) = \chi_{ikj}(\omega_2, \omega_1)$. При $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$ получаем дополнительное правило перестановочной симметрии: $\chi_{ijk}(\omega, \omega) = \chi_{ikj}(\omega, \omega)$

окончательный вид тензора определяется обоими типами симметрии!

Точечные группы внешней симметрии

базовые элементы симметрии

- Поворотные оси симметрии n -го порядка: 2, 3, 4, 6, ∞ (прочие порядки запрещены)
- Плоскость симметрии: m
- Инверсия: $\bar{1}$, порождает инверсные оси $\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$, а ось $\bar{2} \equiv m$

остальные более сложные элементы — суперпозиция базовых

32 кристаллографические группы симметрии

- Низшая категория:
 - Триклинная: 1, $\bar{1}$
 - Моноклинная: 2, m , $2/m$
 - Ромбическая: 222, $mm2$, mmm
- Средняя категория:
 - Тетрагональная: 4, $\bar{4}$, $4/m$, 422 , $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$
 - Гексагональная: 3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622 , $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$
- Высшая категория:
 - Кубическая: 23, $m\bar{3}$, $\bar{4}3m$, 432 , $m\bar{3}m$

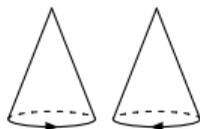
Точечные группы внешней симметрии

базовые элементы симметрии

- Поворотные оси
- Плоскость симметрии
- Инверсия: $\bar{1}$, поро...

остальные

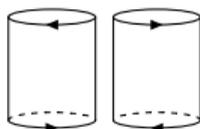
предельные группы (группы Кюри)



∞



∞m



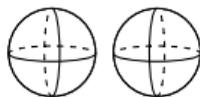
$\infty 2$



∞/m

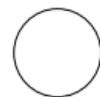


$\infty/m m$



«радиусы крутятся»

$\infty \infty$



$\infty \infty m$

адки запрещены)

я базовых

и

$\infty m 2, 6/m m m$

- Низшая категория:
 - Триклинная
 - Монокли...
 - Ромбическая
- Средняя категория:
 - Тетрагональная
 - Гексагональная

- Высшая категория:
 - Кубическая: $23, m\bar{3}, \bar{4}3m, 432, m\bar{3}m$