

Relaciones de Kramers - Kronig (K.K)

Sabemos entonces que la susceptibilidad  $\chi^{(1)}$  es una cantidad compleja. Vamos a concentrarnos en su dependencia con frecuencia, es decir

$$\chi^{(1)}(\omega) = \chi_1^{(1)}(\omega) + i \chi_2^{(1)}(\omega) \quad (18)$$

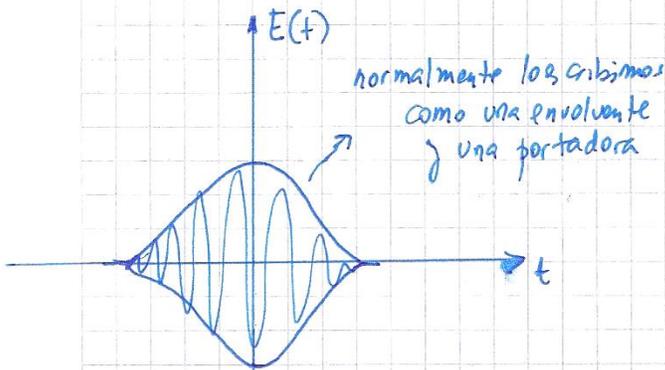
Vamos a ver que las partes real e imaginaria de (18) están relacionadas debido a que  $\chi^{(1)}(\omega)$  representa un proceso físico lineal y causal

para fijar ideas relacionamos  $\chi_1^{(1)}(\omega)$  con dispersión  
 $\chi_2^{(1)}(\omega)$  con absorción

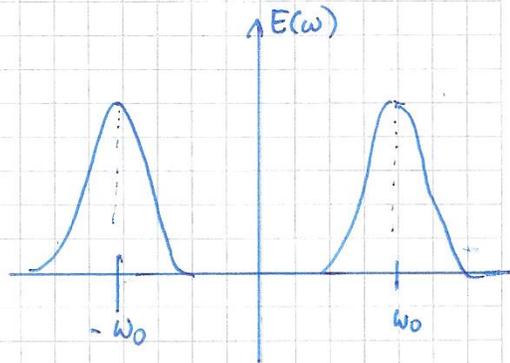
Imaginemos primero que no están relacionados  $\chi_1$  y  $\chi_2$   
 hagamos el siguiente ejercicio mental:

Supongamos que incidimos con un pulso gaussiano

(abandonamos un rato los subíndices de tensor y la dependencia)



T.F.  
 $\Rightarrow$



$$E(t) = \text{Re} \left\{ a(t) e^{i\omega t} \right\}$$

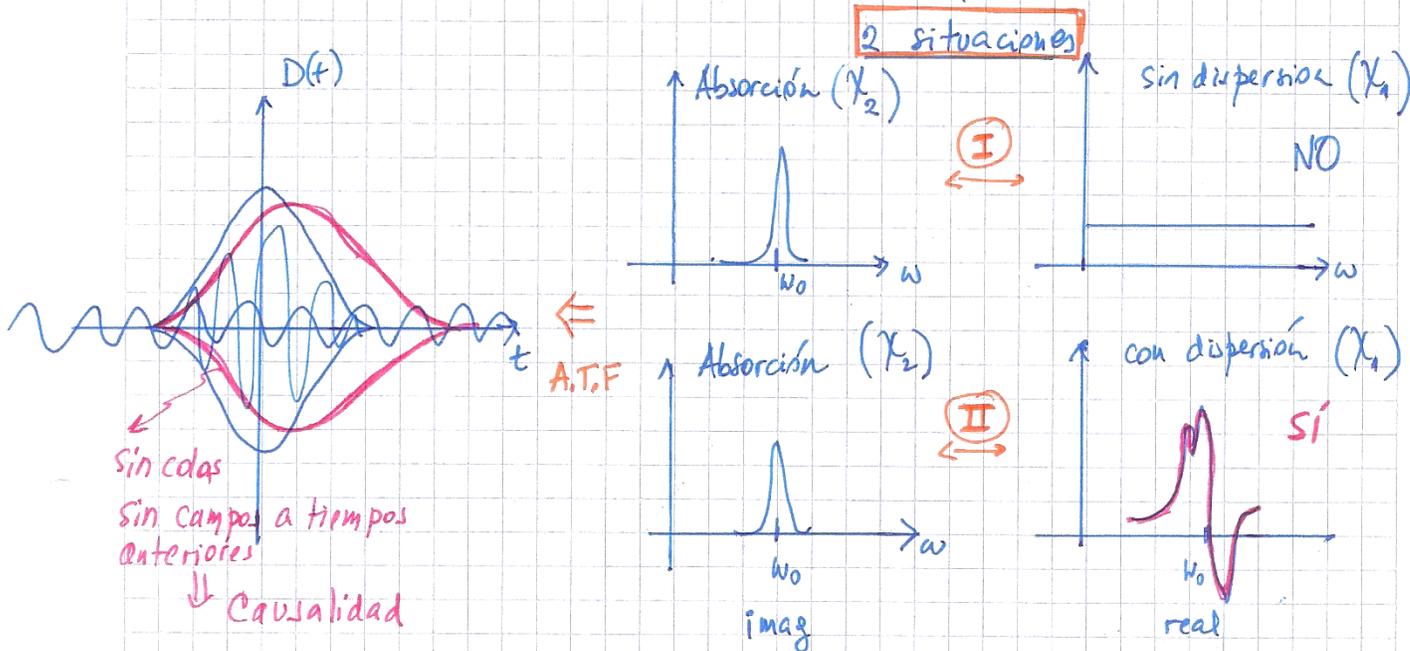
$$= \frac{1}{2} \left\{ a(t) e^{i\omega t} + a^*(t) e^{-i\omega t} \right\}$$

$$E(\omega) \stackrel{*}{=} \frac{1}{2} \left\{ A(\omega - \omega_0) + A^*(-\omega - \omega_0) \right\}$$

donde  $A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} a(t) e^{-i\omega t} dt$   
 $\downarrow$   
 T.F. de la envolvente (en este caso gaussiana)

\* porque  $E(t)$  es real  $\Rightarrow E(-\omega) = E^*(\omega)$   
 (probar)

Si entramos al material cómo quedan los campos:



Si hay absorción TIENE que haber dispersión y vice versa porque se debe cumplir la causalidad

⇒ Ustedes lo pueden probar en este ejemplo, sucintamente lo escribo acá:  
 Supongamos que la absorción es muy aguda

$$D(\omega) = \mathcal{D}(\omega) E(\omega) + iB \delta(\omega - \omega_0) E(\omega)$$

donde  $\mathcal{D}(\omega)$  es alguna función que representa a  $\chi_1$  y  $\chi_2$  es una delta

si  $\mathcal{D}(\omega) = \text{cte} = K_v$

$$\Rightarrow D(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_v E(\omega) e^{-i\omega t} d\omega + iB \underbrace{E(\omega_0)}_b e^{-i\omega_0 t} + \text{c.c}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left\{ K_v E(t) + i b e^{-i\omega_0 t} \right\} + \text{c.c} = \frac{1}{\pi} K_v E(t) + \frac{1}{\pi} b \sin(\omega_0 t)$$

no es físicamente razonable

si  $\mathcal{D}(\omega)$  NO ES cte ; X ejemplo toma valores altos y de signo  $\neq$  muy cerca de  $\omega_0$

$$\mathcal{D}(\omega) = \Delta_+ \delta(\omega_0 - (\omega_0 + \Delta\omega)) + \Delta_- \delta(\omega - (\omega_0 - \Delta\omega))$$

⇒ compensa el seno de la parte imaginaria de  $\chi$

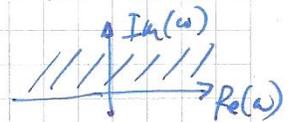
### ⇒ Relaciones K-K

Si  $f(\omega)$  es la T.F de un proceso físico causal  $\Rightarrow$

$$\text{si } f(\omega) = f_1(\omega) + i f_2(\omega) \quad ; \quad f_1 \text{ y } f_2 \text{ reales}$$

y si consideramos  $\omega$  como una variable compleja  $\omega = \omega_1 + i\omega_2$

$\Rightarrow f(\omega)$  es una función analítica en  $\text{Im}(\omega) > 0$



y se cumple que:

$$f_1(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega f_2(\Omega)}{\omega^2 - \Omega^2} d\Omega \quad (19)$$

$$f_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{f_1(\Omega)}{\omega^2 - \Omega^2} d\Omega \quad (20)$$

En el caso de  $\chi^{(1)}$ , la condición física para que se cumpla K-K es la causalidad porque la T.F de  $\chi(t)$  es analítica en el plano superior  $\text{Im}(\omega) > 0$ , ya que converge por el factor  $e^{i\omega t}$

$$\chi(\omega) = \int_0^{\infty} e^{i\omega t'} \chi(t') dt' \quad (21)$$

desde 0 (no  $-\infty$ ) (causalidad)

$\Rightarrow$  Si  $\omega = i\omega_2 \Rightarrow e^{-\omega t}$  es exponencial de decreciente

y  $\chi$  bien conformada

$\Rightarrow$  (21) converge

Si la integral fuera desde  $-\infty$ , no converge

(Pueden leer discusión en el Boyd  
y en el Landau, Electrodynamics of continuous media)

Entonces finalmente escribimos para la susceptibilidad

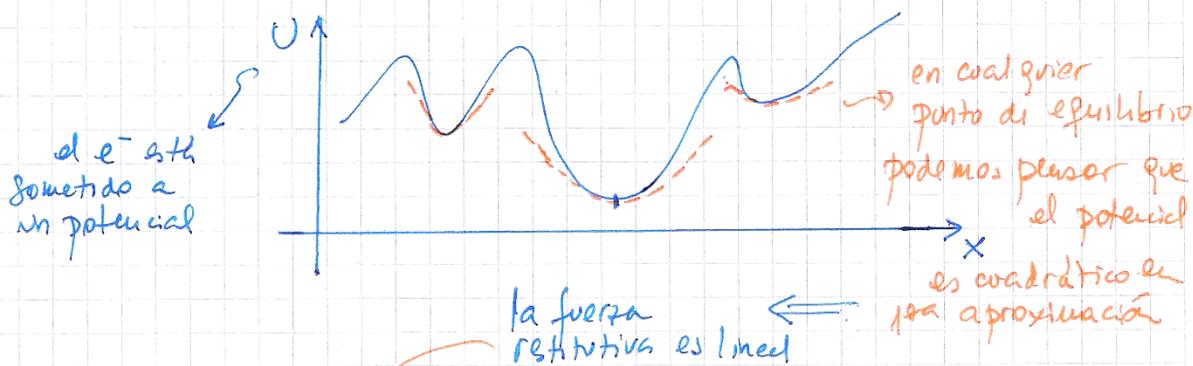
$$\chi^{(1)} = \chi_1^{(1)} + i\chi_2^{(1)}$$

$$\chi_1^{(1)}(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega \chi_2^{(1)}(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (22)$$

$$\chi_2^{(1)}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi_1^{(1)}(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (23)$$

### Modelo Lorentziano de la susceptibilidad

El modelo clásico más simple es considerar a los átomos como simples osciladores armónicos amortiguados. Vamos a considerar acá que la luz interactúa con un átomo que tiene una sola frecuencia de resonancia y que despreciamos el movimiento de los núcleos  $\Rightarrow$  el campo eléctrico de la luz ejerce una fuerza sobre los  $e^-$  que convierte al oscilador en forzado.



ec Newton  $\Rightarrow$

$$(24) \quad m\ddot{\vec{r}} = \underbrace{-k\vec{r} + a\vec{r}^2 + b\vec{r}^3 + \dots}_{\text{fuerza restaurativa}} - \underbrace{\Delta \dot{\vec{r}}}_{\text{damping - fricción}} - \underbrace{e\vec{E}(t)}_{\text{fuerza e-m}}$$

engañes colisiones  $\downarrow$  en sólidos, fonones térmicos

Supongamos que la ecuación es monocromática  $E(t) = \frac{1}{2} E_{\omega} e^{-i\omega t} + c.c.$

$\Rightarrow m \ddot{\vec{r}} = -m\omega_0^2 \vec{r} - m\gamma \dot{\vec{r}} - e E(t)$  (25)

lineal  $\downarrow$   
buscamos solución del tipo  $\vec{r}(t) = \vec{r}_{\omega} e^{-i\omega t}$

$\Rightarrow \vec{r}(t) = - \frac{e \vec{E}(t)}{m_e (\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)}$  (26)

$\vec{P}$  es la densidad de polarización, el número de osciladores  $N_{osc}$  por volumen  $V$ , multiplicado por el momento dipolar individual  $-e\vec{r}$ , es decir que  $\vec{P} = -e \frac{N_{osc}}{V} \cdot \vec{r} + c.c$

$\Rightarrow$  de (26)  $\vec{P}(t) = \frac{e^2 N_{osc}}{m_e V} \frac{\vec{E}(t)}{(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)} + c.c.$  (27)

transformando Fourier

$$\vec{P}(\omega) = \epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega) \vec{E}(\omega)$$

donde  $\chi^{(1)}(\omega) = \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m_e} \cdot \frac{1}{\mathcal{D}(\omega)}$  (28)

donde  $n = \frac{N_{osc}}{V}$

y  $\mathcal{D}(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}$  es la función Lorentziana compleja

Recordamos de (11) que el tensor dieléctrico para un medio homogéneo será

$$\underline{\underline{\epsilon(\omega) = 1 + \chi^{(1)}(\omega)}} \quad (29)$$

y usamos (28) para escribir (29) en sus partes real e imag

⇒ con un poco de álgebra si  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$

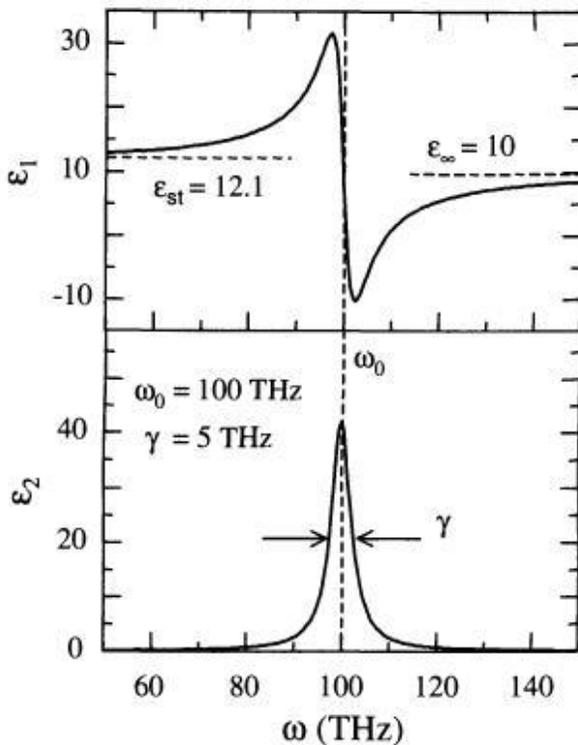
$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m e} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma \omega)^2} \quad (30)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\omega \gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma \omega)^2} \quad (31)$$

para frecuencias muy alejadas de la resonancia, muy bajas o muy altas:

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega_0) &\equiv \epsilon_{ST} = 1 + \frac{\Omega_p^2}{\omega_0^2} \\ \epsilon(\infty) &\equiv \epsilon_\infty = 1 \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{donde } \Omega_p = \left( \frac{ne^2}{\epsilon_0 m e} \right)^{1/2} \\ \epsilon_{ST} = \epsilon_\infty + \frac{\Omega_p^2}{\omega_0^2} \\ \text{es la frecuencia del plasma} \end{array} \right\} \quad (32)$$

Si lejos de la resonancia no vale el modelo lorentziano podemos pensar en una susceptibilidad de "fondo" y el 1 en (32) puede ser mayor



Ejemplo de un esalader con valores típicos para una línea de absorción en el IR en un cristal iónico

## Propagación en un medio dispersivo

Las ecuaciones de Maxwell son compatibles con soluciones de ondas viajeras, que representan el transporte de energía de un lugar a otro. En un medio sin cargas libres ni corrientes libres, usando las relaciones constitutivas para  $\bar{D}$  y  $\bar{H}$  podemos escribir las E.M como:

$$\bar{\nabla} \times \bar{E} = -\mu_0 \mu \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \quad (33)$$

$$\gamma \quad \bar{\nabla} \times \bar{H} = \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \quad (34) \quad (\text{nos sacamos de encima } \bar{D} \text{ y } \bar{B})$$

tomando el rotor de (33) y usando (34) queda

$$\bar{\nabla} \times \bar{\nabla} \times \bar{E} = -\mu_0 \mu \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2}$$

usando la identidad vectorial  $\bar{\nabla} \times \bar{\nabla} \times \bar{E} = \bar{\nabla}(\bar{\nabla} \cdot \bar{E}) - \nabla^2 \bar{E}$  y  $\bar{\nabla} \cdot \bar{E} = 0$

nos queda  $\nabla^2 \bar{E} = \mu_0 \mu \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2}$  (35)

que es una ecuación de onda del tipo  $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

identificamos de (35)  $\frac{1}{v^2} = \mu_0 \mu \epsilon_0 \epsilon$  ↙ velocidad de la onda

en el espacio libre  $\epsilon = \mu = 1 \Rightarrow c \equiv \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$  es la velocidad de la luz en el vacío

y en un medio con  $\epsilon$  y  $\mu$   $v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon \mu}} \stackrel{\mu=1}{\downarrow} \frac{c}{n}$  → Índice de refracción  
óptica

⇒ busquemos una solución a (35) del tipo de ondas planas  $e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$

reemplazando en (35) queda  $\frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \epsilon(\omega)$  Es la relación de dispersión para la solución de onda plana  
(36)

Si el medio no es dispersivo, el frente de ondas viaja a la velocidad

$$\frac{c}{\sqrt{\epsilon}} = \frac{c}{n} \quad y$$

$$\boxed{v_p \equiv \frac{\omega}{k}} \quad \text{es independiente de la frecuencia}$$

$\rightsquigarrow$  velocidad de fase

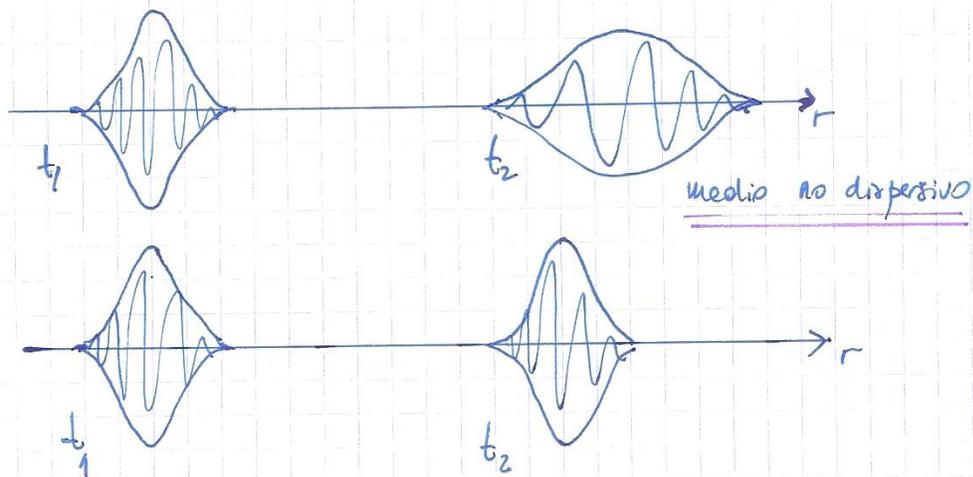
en el exponente Armónico  $i(kr - \omega t)$  ;  $k(r - v_p t)$  (37)

$$- \omega \left( t - \frac{x}{v_p} \right)$$

$\Rightarrow$  si consideramos un paquete de ondas propagándose, como la superposición de muchas ondas planas, todas las componentes del paquete avanzan a la misma velocidad y el paquete no se distorsiona

En cambio si  $\epsilon(\omega) \Rightarrow$   $\boxed{v_p = \frac{\omega}{k(\omega)}} \quad (38)$  el paquete de ondas se deforma

medio dispersivo



Si escribimos (37) como  $k \cdot \Delta r = k(\omega) \cdot \Delta r(\omega)$  representa un retrato de fase dependiente de  $\omega$  asociado a la propagación a través de  $\Delta r$

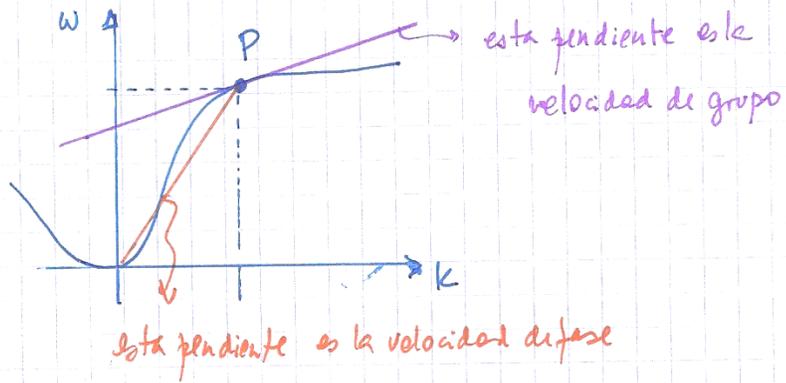
podemos decir como 1era aproximación que  $k(\omega)$  lo podemos escribir

$$k(\omega) = k|_{\omega_0} + \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \dots \approx k_0 + k' \Delta \omega$$

donde  $\omega_0$  es una frecuencia central de paquete (la portadora)

Se le llama  $\frac{1}{k'} = v_g^{-1} = \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0}$  velocidad de grupo (inversa)

Para una relación de dispersión arbitraria



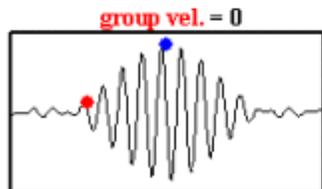
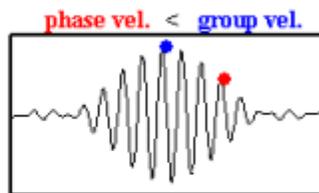
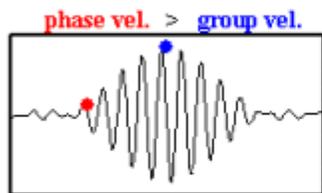
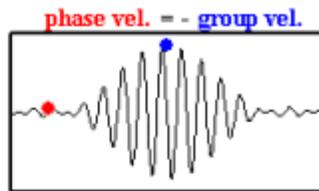
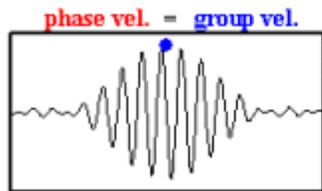
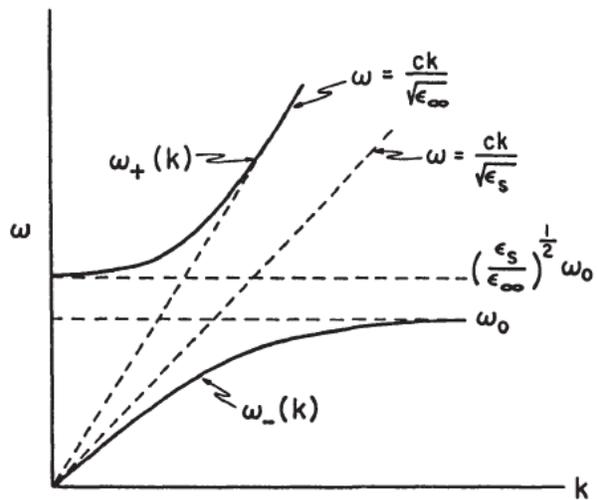
Si usamos la relación de dispersión de Lorentz queda (sin damping) ecuación (30), se puede llegar (ver Mills para la cuenta) a:

$$\frac{c^2 k^2}{\omega^2} = \epsilon_{\infty} + \frac{\Omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \rightarrow$$

↓

si  $E < 0 \Rightarrow k$  imaginario puro  
 $\rightarrow$  no hay propagación

cuando  $k \rightarrow 0 \quad v_p \rightarrow \infty$ ;  $v_g$  finita



Medios anisótropos

Hasta ahora consideramos un medio lineal, isotropo y homogéneo (L.H.I.) y  $\chi$  y  $\epsilon$  los consideramos escalares.

Ahora consideremos un crystal, para el cual la propagación de ondas en distintas direcciones no será igual. Es decir consideramos

$\epsilon_{ij}$  o  $\overset{\leftrightarrow}{\epsilon}$  un tensor de segundo orden

para un material sin pérdidas

( $\epsilon_{\alpha\beta}$  es real, aunque sabemos que es una aproximación)

Como el tensor  $\epsilon_{ij}$  tiene todos sus elementos reales  $\Rightarrow \overset{\leftrightarrow}{\epsilon}$  es hermitico y entonces existe un sistema de coordenadas para el cual  $\epsilon_{ij}$  es

diagonal

En el sist de ejes ppales  $\Rightarrow$

$$\bar{D} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \cdot \bar{E}$$

sistema de coordenadas de ejes principales

o equivalentemente

$$\bar{D} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} n_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_z^2 \end{bmatrix} \cdot \bar{E}$$

con  $n_i^2 = \epsilon_{ii}$

Si  $n_x \neq n_y \neq n_z \Rightarrow$  cristal biaxial

Si dos indices son iguales  $n_x = n_y \Rightarrow$  cristal uniaxial

$n_0$  indice ordinario  $\rightarrow$  si  $n_0 < n_z \Rightarrow$  positivo

si  $n_0 > n_z \Rightarrow$  negativa

Si todos los indices son iguales  $\Rightarrow$  cristal isotropo

$n \rightarrow$  para este caso tenemos, la relación de dispersión (36)

$$k^2 = \left(\frac{\omega n}{c}\right)^2 \quad (39)$$

En término de sus componentes (39) es

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{\omega n^2}{c}\right)^2 \quad (L1H)$$

y una forma alternativa de escribirlo es

$$\frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{n^2} - k_0^2 = 0 \quad \text{siendo } \underline{k_0 = \frac{\omega}{c}} \quad (\text{vector de onda en el vacío})$$

Pero ahora tenemos que derivar la relación de dispersión para un material anisotrópico, partiendo de las E.M y llegando a la ecuación de onda pero atendiendo ahora a que  $\epsilon, n$  son tensores

Como vamos a proponer soluciones de ondas planas monocromáticas  $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \quad \text{y} \quad \nabla \rightarrow i\mathbf{k} \quad // \quad \underline{\underline{\mathbf{k} = \frac{n\omega}{c} \hat{k} = k_0 n \hat{k}}}$$

de donde las E.M quedan (sin cargas ni corrientes libres)

$$(40) \quad \nabla \cdot \bar{D} = 0 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{k} \cdot \bar{D} = 0$$

$$(41) \quad \nabla \times \bar{E} = -\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} \quad \longrightarrow \quad \frac{n}{c} \hat{k} \times \bar{E} = \bar{B} \quad \left( \bar{B} = \mu_0 \bar{H}, \text{ medio no magnético} \right)$$

$$(42) \quad \nabla \cdot \bar{B} = 0 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{k} \cdot \bar{B} = 0$$

$$(43) \quad \nabla \times \bar{H} = \frac{\partial \bar{D}}{\partial t} \quad \longrightarrow \quad \frac{n}{c} \hat{k} \times \bar{H} = \bar{D}$$

Combinando (41) y (43) queda (y usando  $\mathbf{a} \times \mathbf{b} \times \mathbf{c} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c}$ )

$$\mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \bar{E}) - |\mathbf{k}|^2 \bar{E} + k_0^2 [\hat{k} \cdot \bar{E}] \bar{E} = 0 \quad (44)$$

relación de dispersión para cristal anisotrópico

(44) tiene componentes vectoriales de la forma

$$(\dots) \hat{x} + (\dots) \hat{y} + (\dots) \hat{z} = 0 \quad (45)$$



ya su vez cada término tiene la forma  $(\dots) E_x + (\dots) E_y + (\dots) E_z$

pero cada una de las componentes de (45) son = 0 ⇒

0  
para las 3  
direcciones

En forma matricial se puede escribir

$$\begin{bmatrix} (\dots) & (\dots) & (\dots) \\ (\dots) & (\dots) & (\dots) \\ (\dots) & (\dots) & (\dots) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = 0$$



se calcula el determinante ⇒ se obtienen los autovalores para k

Haciendo las cuentas (ii) queda la siguiente ecuación:

$$\frac{k_x^2}{|\vec{k}|^2 - k_0^2 n_x^2} + \frac{k_y^2}{|\vec{k}|^2 - k_0^2 n_y^2} + \frac{k_z^2}{|\vec{k}|^2 - k_0^2 n_z^2} = 1 \quad (46)$$

↓ se puede hacer algebra y poner de muchas maneras

Para un cristal uniaxial:

$$n_x = n_y = n_o \quad \text{y} \quad n_z = n_e$$

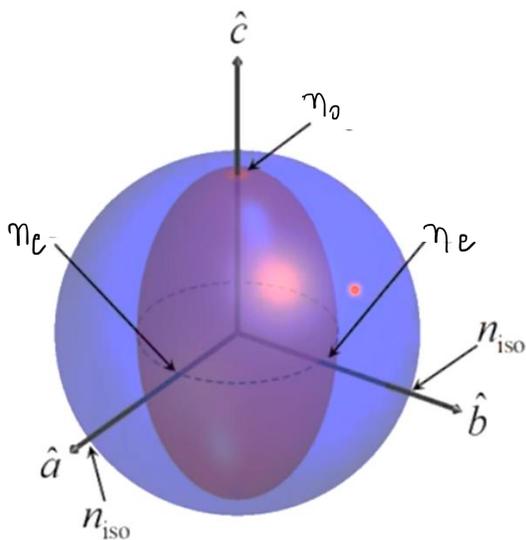
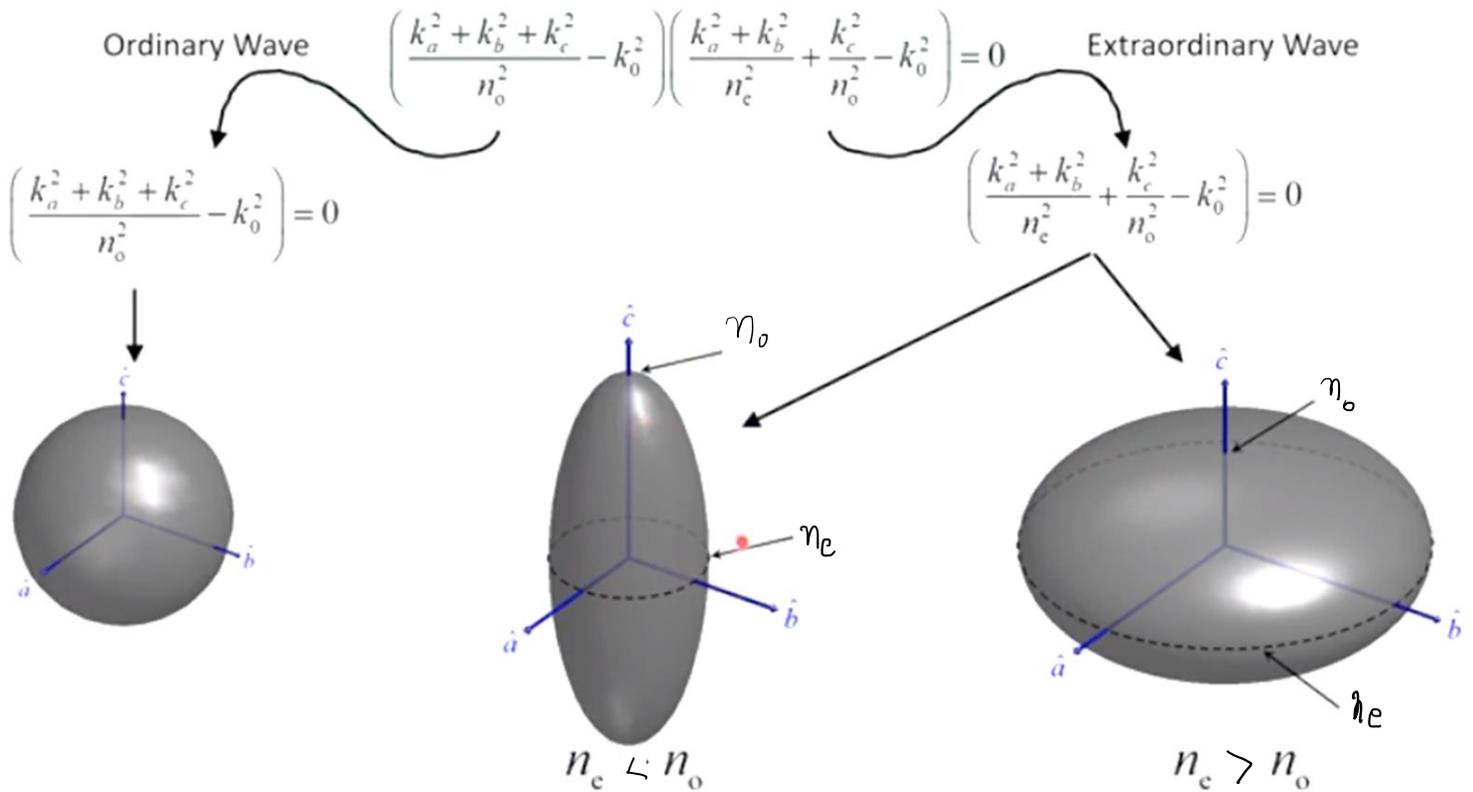
quede ↗ esfera: ordinaria ↘ elipse: extraordinaria

$$\left( \frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{n_o^2} - k_0^2 \right) \cdot \left( \frac{k_x^2 + k_y^2 + \frac{k_z^2}{n_o^2}}{n_e^2} - k_0^2 \right) = 0 \quad (47)$$

relación de dispersión para un cristal UNIAxIAL

# Superficies de dispersion para cristales UNIAXIALES (47) (Acá a=x, b=y, z=c)

2 soluciones

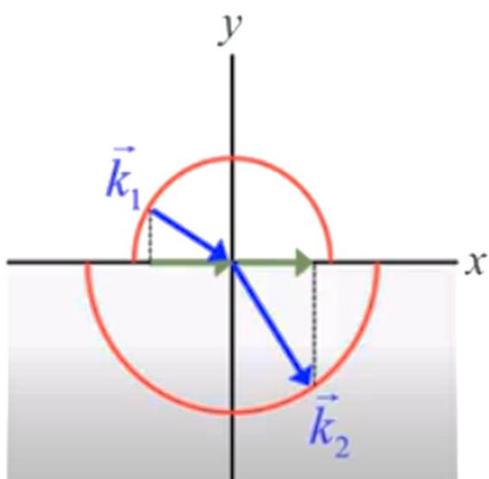


Si ponemos ambas soluciones juntas vemos que tienen un eje en común y las soluciones se tocan arriba y abajo

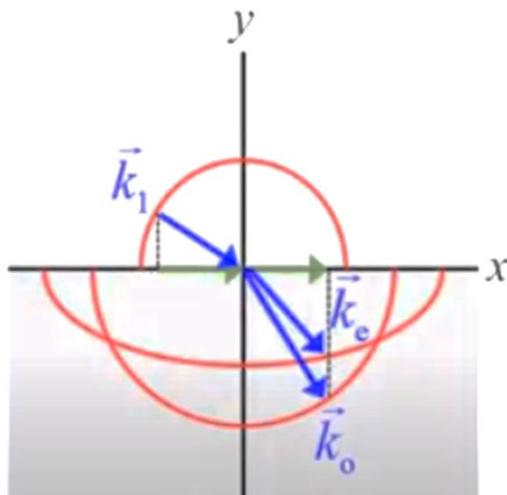
Una onda propagándose en esa dirección, c, no puede elegir entre una solución u otra, así que es como si se propagara en un medio isótropo con índice n ordinario. Esa dirección es el “eje óptico”

**Elipsoide de índices:** Son las mismas superficies que vimos hasta ahora para k, pero normalizado por  $k_0$  para que sea la superficie de índices de refracción

Veamos la propagación en un plano



2 materiales Isotropos  
Refracción



1 material isotropo - 1 material anisotropo  
Doble refracción  
(cristal birrefringente)



Espato de Islandia, la navegación de los vikingos

Si volvemos a la ecuación (47) y consideramos propagación en el plano (da lo mismo que sea  $x-z$  o  $y-z$ )

tenemos que 
$$\frac{k_z^2}{n_o^2} + \frac{k_x^2}{n_e^2} = k_o^2$$

⇒ como  $k_x = k \sin \theta$ ,  $k_z = k \cos \theta$  y  $k = n(\theta) k_o$ , tenemos para el índice de refracción de la onda extra...

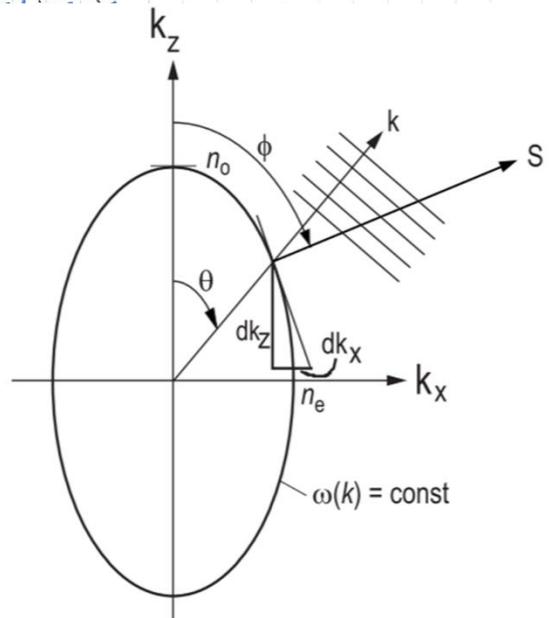
$$\frac{1}{n(\theta)^2} = \frac{\cos^2 \theta}{n_o^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_e^2} \quad (48)$$

la velocidad de grupo  $v_g$

$$v_g = \nabla_k \omega(k) \parallel \vec{S}$$

⇒ paralela al vector de Poynting

$v_g$  normal a superficie de dispersión y el elipsoide de índices



⇒ generalmente  $\vec{k} \perp$  al frente de ondas

NO es  $\parallel S$

si en un cristal isotropo (el elipsoide es una esfera)

