А. Г Хаткевич, Л. А. Хаткевич

О ГРУППОВОЙ ОСНОВЕ КВАНТОВОЙ КРИСТАЛЛООПТИКИ

В феноменологической электродинамике сплошных сред уравнения Максвелла дополняются уравнениями связи векторов электрической и магнитной индукции $\bar{D}$ и $\bar{B}$ и напряженностей $\bar{E}$ и $\bar{H}$ Эти уравнения в общем случае выражаются следующим образом

$$\bar{D} = \varepsilon\bar{E} + \gamma\bar{H},\ \ \bar{B} = \mu\bar{H} + \gamma^{+}\bar{E}, \tag{1}$$

где ε, μ и γ - тензоры относительных электрических и магнитных проницаемостей и магнитоэлектрических восприимчивостей и γ^{+} - эрмитово сопряженный тензор, который является вещественным транспонированным в негиротропных магнитоэлектриках Тензоры ε и μ в собственно гиротропных кристаллах комплексные эрмитовы.

Введем квадратные корни тензоров непроницаемостей $A = \varepsilon^{-1/2}$ и $B = \mu^{-1/2}$, собственными значениями которых определяются обратные главные показатели преломления среды. Тогда роторные уравнения Максвелла, которыми описывается изменение электромагнитного поля в среде, представляются в следующей симметризованной форме [1, 2]:

$$\partial\bar{H}' + U'\bar{E}' = 0,\ \partial\bar{E}' + U\bar{H}' = \bar{J}', \tag{2}$$

где $\partial = \partial/\partial t$ - производная по времени и вместо векторов электрической и магнитной напряженности и электрического тока проводимости $\bar{J}$ введены электрический и магнитный векторы $\bar{E}' = A^{-1}\bar{E}$, $\bar{H}' = B^{-1}\bar{H}$ и вектор $\bar{J}' = -A\bar{J}$, а также линейные дифференциальные (инфинитезимальные) операторы $U' = B(\partial\gamma^{+} + \bar{\nabla}^{\times})A$ и $U = A(\partial\gamma - \bar{\nabla}^{\times})B$, в которых $\bar{\nabla} = \partial/\partial\bar{r}$ - пространственные производные, $\bar{\nabla}^{\times} = \nabla_i\delta_{ijk}$ и δ_{ijk} - символы Леви-Чивита. При $\bar{J} = 0$ исключение одного из векторов преобразует (2) в систему однородных волновых уравнений $\partial^2 = UU' = U'U$.

Для монохроматических плоских волн дифференциальные уравнения сводятся к алгебраическим, которые формально получаются заменой производных соответственно круговой частотой и волновым вектором: $\partial \Rightarrow i\omega$ и $\bar{\nabla} \Rightarrow i\bar{k}$. Тогда векторы и операторы преобразуется в их фурье-образы, которые представляются векторными амплитудами волн и спектральными матрицами или тензорами: линейными тензорами $U' = B(\omega\gamma^{+} + \bar{k}^{\times})A$ и $U = A(\omega\gamma - \bar{k}^{\times})B$ и волновым тензором

$U'U = U\,U' = \omega^2 I$ После вве, ения соотношением $\bar{m} = \bar{k}/\omega = n\bar{n}$ вектора показателей преломления последнее выражение для волнового оператора сводится к соотношению ортогональности или унитарности в гиротропных кристаллах. Следовательно, в обоих случаях параметры волн в кристаллах определяются одним ортогональным или унитарным тензором U/ω, линейно зависящим от направления нормали.

Если кристалл не является естественно гиротропным или магнитоэлектриком, то $\gamma = 0$ и линейный оператор является тензорным оператором $U = -A\bar{\nabla}^{\prime\times}B = -C\bar{\nabla}$, который представляет собой свертку векторного оператора $\bar{\nabla}$ с тензором оптических (структурных) постоянных 3-го ранга: $C = -A^{\times}B = B^{+\times}A^{+} = -C'$, образованным тензорами корней непроницаемостей. В общем случае из-за антисимметричности оператора $\bar{\nabla}^{\times}$ тензорный оператор антиэрмитов бесследный и планальный: $\mathrm{Sp}U = 0$ и $\mathrm{Det}U = 0$. После умножения на i этот оператор становится эрмитовым и в общем случае, как инфинитезимальный унитарного унимодлярного оператора второго ранга [3], имеет девять компонент, из которых только восемь линейно независимы и разделяются на положительные и отрицательные, и представляется в виде: $iU = (C_+ + iC_-)\bar{\nabla}$, где $C_\pm = (C \pm C^{+})/2$ - симметричная вещественная и антисимметричная мнимая составляющие. Этот эрмитов тензорный оператор дуален комплексному 4-векторному и, в частности, векторному оператору $\bar{U}$ и выражается в виде $U = \bar{U}^{\times}$.

В случае негиротропного магнитного диэлектрика (магнетика) тензор C вещественный и U – ортогональный оператор, аналогичный оператору полного момента импульса. Его антисимметричная (орбитальная) составляющая образуется из средних величин соответствующих недиагональных компонент и дуальна вещественной составляющей комплексного векторного оператора. Симметричная же (спиновая) составляющая образуется из полуразностей, представляется мнимой составляющей, характеризует анизотропию двупреломления среды и может содержать четвертую диагональную компоненту, которая исчезает в так называемом базисе Картана. В диэлектриках картановским является собственный базис тензора ε, а в магнетиках кристаллофизический базис ромбической и более симметричных систем.

Отнесенный к показателю преломления тензор оказывается тензором скорости, а фурье-образ комплексного векторного оператора – вектором лучевой (групповой) скорости $U/k = -A\bar{n}^{\times}B = -(\bar{u}_+ + i\bar{u}_-)^{\times}$, где $\bar{u}_+$ - векторы средней лучевой скорости изонормальных волн и полуразности их скоростей. Поскольку удовлетворяется соотношение $\left[\vec{u}\vec{u}^*\right]=0$ комплексный вектор скорости является линейным, то есть вещественным. Инвариант тензора скорости является следом квадрата тензора и равен удвоенному квадрату вектора скорости: $\vec{u}^2 = Sp(U^2)/2$. Нормированным вектором скорости представляется двухполостная лучевая или волновая поверхность: $\vec{u}^2 = 1$. Кратные точки поверхности соответствуют оптическим осям и определяются равенством $\vec{u}_\bullet=0$. Фазовые скорости являются проекциями на волновую нормаль. $v = \vec{u}\vec{n}$. Векторы поляризации волн определятся вещественными составляющими вектора $\vec{u}_\pm^* = (u_{\cdot 1}\bar{i}_1 \pm iu_{\cdot 2}\bar{i}_2)/\sqrt{2}$

Целесообразно представить тензоры корней непроницаемостей в собственных базисах $\vec{e}_i$ и $\bar{h}_i$ и ввести посредством соотношений

$$A = A_i\vec{e}_i\cdot\vec{e}_i = \bar{A}\cdot\vec{e}_i = |A|\,\bar{a}\cdot\vec{e}_i = |A|\,a,$$
$$B = B_i\bar{h}_i\cdot\bar{h}_i = \bar{B}\cdot\bar{h}_i = |B|\,\bar{b}\cdot\bar{h}_i = |B|\,b,$$

где точка означает диадное умножение, а $|A| = Sp[(\varepsilon^{-1})]^{1/2}$ и $|B| = Sp[(\mu^{-1})]^{1/2}$ - корни инвариантов, векторы корней главных непроницаемостей $\bar{A}$ и $\bar{B}$, их орты $\bar{a}$ и $\bar{b}$, а также нормированные тензоры a и b. Тогда ортогональный тензор выражается следующим образом:

$$U/\omega = |C|a\bar{n}^{\times}b = |C|n(\bar{a}_i\bar{n}^{\times}\bar{b}_k)\,\bar{e}_i\cdot\bar{h}_k = |C|nq = |C|nq_\pm, \qquad (3)$$

где $|C| = |A||B|$ - скалярный коэффициент. Введем также представленный в виде смешенного произведения единичных векторов тензор оптической анизотропии $q = a\bar{n}^{\times}b = \bar{a}\,\bar{n}^{\times}\bar{b}$ и его симметричная и антисимметричная составляющие $q_{\pm ik}=(\bar{a}_i\bar{n}^{\times}\bar{b}_k)_\pm=[(\bar{a}_i\bar{n}^{\times}\bar{b}_k) \pm (\bar{b}_i\bar{n}^{\times}\bar{a}_k)]/2$.

Рассмотрим теперь квантовые свойства излучения в магнетиках, гиротропных кристаллах и магнитоэлектриках на основе его представления векторным дифференциальным оператором моментного типа. Компоненты оператора $\bar{U}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям: $[\bar{U}_i\bar{U}_k] = \delta_{ijk}\,\bar{U}_i\,\bar{U}_k = \bar{U}_j$ и коммутируют с инвариантом $\bar{U}^2$. Из-за коммутационных соотношений в кристалле могут быть определены одновременно как собственные значения только одна компонента векторного оператора и его квадрат и, следовательно, как фурье-компоненты оператора: фазовая скорость, величина лучевой скорости волн и представляющие их оптические поверхности.

Собственные функции и значения оператора определяются в результате введения компонент $\bar{U}'^{\pm} = (\bar{U}_1 \pm i\bar{U}_2)/\sqrt{2}$, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям: $\left[\bar{U}_3U'^{+}\right]=\bar{U}'^{+}$,

$\left[\bar{U}_3 \bar{U}'^{-}\right] = -\bar{U}'^{-}$, $\left[\bar{U}'^{+} \bar{U}'^{-}\right] = U_1$, и представления векторного оператора и его инварианта следующим образом. $\bar{U} = \bar{U}_3 + \bar{U}'^{+} \pm \bar{U}'^{-}$ и $\bar{U}^2 = \bar{U}_3^2 + \bar{U}'^{+}\bar{U}'^{-} + \bar{U}'^{-}\bar{U}'^{+}$. Тогда решение представляется (через собственные значения) в виде

$$\bar{U}^2 Y_{jm} = j(j+1)Y_{jm},\ \bar{U}_3 Y_{jm} = mY_{jm},\ \bar{U}'^{\pm} Y_{jm} = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_{jm}, \quad (4)$$

где $j \geq 0$ целое (или полуцелое) число, $m = -j, -j+1, \ldots, j$ и Y_{jm} – сферические функции, представляющие пучки волн, в качестве собственных функций. Отсюда вытекает, что скорости и их оптические поверхности, как квантовые величины, могут иметь дискретный спектр.

На основании коммутационных соотношений также легко получается решение этой задачи на собственные значения в другой более известной и чаще используемой форме замещением базисных ортов $\mathbf{i}_i$ матрицами Паули σ_i. Эти матрицы удовлетворяют коммутационным соотношениям $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ijk}\sigma_k$ и вместе с единичной матрицей $\sigma_0 = I$ (и с матрицами $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm \sigma_2$) образуют базис, в котором не только вектор, но и 4-вектор (кватернион) выражается в виде двумерной матрицы (биспинора) (так обычно представляется поляризационная матрица, а также матрицы когерентности и плотности). Тогда для векторного оператора в магнетиках непосредственно получаем: $\bar{U} = \bar{U}_i \sigma_i$. Компоненты этого оператора имеют прежний смысл и легко связываются с параметрами Стокса, квантовыми числовыми операторами и операторами рождения и уничтожения, а собственные значения и инвариант выражаются в виде (4). Тензор анизотропии при использовании углов Эйлера выражается следующим образом [2]: $q = \exp -i(\delta/2)\bar{n}\sigma = \exp -i(\varphi+\psi)/2\sigma_3 \exp -i\theta/2\sigma_2 \exp -i(\varphi-\psi)/2\sigma_3$, где $\psi = \mathrm{arctg}\, u_2/u_1$.

В собственно гиротропных магнетиках тензор U становится эрмитовым: в (3) изменяется выражение скаляра, орты оказываются комплексными и, следовательно, число вещественных параметров тензора удваивается. В результате индуцирования дополнительного спинового момента и вращения со сдвигом $[\overline{uu^*}] \neq 0$ комплексный вектор скорости оказывается не линейным, а эллиптическим или круговым вектором и волны эллиптически или циркулярно поляризованными. Собственные векторы эрмитова тензора принадлежат унитарному (гильбертову) пространству, и дополнительная составляющая вектора скорости не исчезает в направлениях оптических осей

В естественно гиротропных кристаллах $\gamma = \bar{\gamma}^*$ из-за присоединения мнимого оператора $\partial\gamma^*$ оператор $\bar{\nabla}^* + i\partial\bar{\gamma}^* = \bar{\nabla}'^*$ становится комплексным. Ортогональный тензор в выражении (3) также оказывается эрмитовым, а векторный тензор скорости $\bar{u}$ - комплексным нелинейным Однако теперь дополнительный спиновый момент из-за естественной гиротропии и соответствующая мнимая составляющая постоянны, не зависят от направленности вектора волновой нормали $\bar{n}$, которая для встречных волн изменяет знак. В результате в естественно гиротропных кристаллах (в отличие от собственно гиротропных) право- и лево-поляризованные встречные волны имеют разные скорости.

В естественно гиротропных магнитоэлектриках γ эрмитов тензор с $\mathrm{Re}\,\gamma \neq 0$ и комплексно сопряженные системы 3-х уравнений в (2), которые выше были сведены к системам 2-х уравнений, оказываются связанными постоянным слагаемым Двухкомпонентные электрический и магнитный векторы (спиноры) объединяются в один 4-х компонентный вектор (биспинор или кватернион). В результате система (2) становится подобной уравнениям Дирака в стандартном представлении Появление 4-х векторов при распространении излучения в кристалле может быть объяснено индуцированием, наряду со спином, сохраняющегося тока смещения и заряда.

В негиротропных магнитоэлектриках $\bar{\gamma}^{\times} = 0$, унитарный тензор оказывается ортогональным т. е. имеет место явление невзаимности. В общем случае эрмитовы и тензоры непроницаемостией и магнитоэлектрики, как и магнетики, могут обладать естественной и собственной гиротропией. В последнем случае $\mathrm{Re}\,\gamma = 0$, но скорости и векторы поляризации встречных волн оказываются разными и также имеет место явление невзаимности

В более объемной статье будет показано, что вытекающая из уравнений Максвелла система 4-х волновых уравнений для потенциалов в анизотропной среде также представляется системой уравнений первого порядка, которая сводится к (2) кулоновской (нерелятивистской) калибровкой потенциалов. Здесь принято наиболее простое и естественное изложение, основанное на [1,2] и не требующее для восприятия особой подготовки.

Выполнение исследований частично поддержано МНТЦ (проект B-479-00).

Литература

1. *Khatkevich A.G., Khatkevich L. A* New approach in crystal optics Proc SPIE.2001 Vol. 4358 P. 191–195
2. *Хаткевич А.Г., Хаткевич Л. А* Групповое представление волн в гиротропных кристаллах // ЖПС 2002 Т 69, № 1 С 97–103
3. *Федоров Ф.И.* Группа Лоренца М Наука 1979 386 с