ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2005, том 405, № 3, с. 1–6

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 514.8 : 535.5

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПРИ НЕЭРМИТОВЫХ ВОЗМУЩЕНИЯ

© 2005 г. О. Н. Кириллов, А. А. Майлыбаев, А. П. Сейранян

Представлено академиком С.С. Григоряном 26.05.2005 г.

Поступило 23.05.2005 г.

В работах [1, 2] установлено, что энергетические поверхности квантовых систем могут пересекаться, образуя коническую особенность, которая часто называется "диаболо", а вершина конуса – "диаболической точкой" [3]. С математических позиций энергетические поверхности описываются собственными значениями вещественных симметрических и эрмитовых операторов (гамильтонианов), зависящих от двух и более параметров, а диаболическая точка характеризуется двукратным собственным значением с двумя линейно независимыми собственными векторами. В кристаллооптике аналогом диаболических точек являются оптические оси, характеризующиеся совпадением коэффициентов преломления [4, 5]. В современных задачах квантовой физики, физической химии, кристаллооптики и акустики важно знать, как коническая особенность энергетической поверхности деформируется при произвольном комплексном возмущении, описывающем диссипативные и другие неконсервативные эффекты, с образованием особенностей, отвечающих жордановым блокам [6–9].

В настоящей работе изучаются особенности энергетических поверхностей, образованных собственными значениями вещественных симметрических и эрмитовых матриц, зависящих от параметров, при произвольном комплексном возмущении. С использованием теории бифуркаций собственных значений, развитой в [10], выведены общие асимптотические формулы, описывающие деформацию энергетической поверхности в окрестности конической особенности для различных типов комплексных возмущений. Оказывается, что деформация поверхностей собственных значений описывается при помощи собственных значений, собственных векторов и производных гамильтониана по параметрам, вычисленных в диаболической точке. В качестве приложения изучены особенности поверхностей коэффициентов преломления в кристаллооптике. Получены явные выражения для этих поверхностей в зависимости от свойств кристалла. Найдены сингулярные оси для кристаллов со слабым поглощением и оптической активностью. В терминах компонент обратного диэлектрического тензора выведено новое условие, различающее кристаллы с преобладанием поглощения и кристаллы с преобладанием оптической активности.

1. Рассмотрим задачу на собственные значения

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u} \qquad (1)$$

для эрмитовой матрицы $\mathbf{A}$ размерности $m \times m$, где λ – собственное значение, а $\mathbf{u}$ – собственный вектор. Такие задачи на собственные значения возникают в обратимых и необратимых физических системах без диссипации. Этим двум случая соответствуют вещественные симметрические и комплексные эрмитовы матрицы [9]. В частности, в задачах квантовой механики $\mathbf{A}$ соответствует гамильтониану, λ – уровню энергии, а $\mathbf{u}$ – вектору состояния. Предполагается, что матрица $\mathbf{A}$ гладко зависит от вектора n вещественных параметров $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_n)$.

Пусть λ_0 – двукратное собственное значение матрицы $\mathbf{A}_0 = \mathbf{A}(\mathbf{p}_0)$ при некотором фиксированном векторе $\mathbf{p}_0$. Поскольку $\mathbf{A}_0$ – эрмитова матрица, собственное значение λ_0 – вещественное с двумя линейно независимыми собственными векторами $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$. Таким образом, точка взаимодействия двух собственных значений является диаболической. Выберем собственные векторы так, чтобы удовлетворялись условия нормировки

$$(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) = 1, \quad (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = 0, \qquad (2)$$

где $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{m} u_i \bar{v}_i$ – скалярное произведение векторов в C^m.

При возмущении параметров $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \Delta\mathbf{p}$ двукратное собственное значение λ_0 распадается на

Научно-исследовательский институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

два простых λ_+ и λ_-, определяемых асимптотической формулой [10]

$$\lambda_\pm = \lambda_0 + \frac{\langle \mathbf{f}_{11} + \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle}{2} \pm \pm\sqrt{\frac{\langle \mathbf{f}_{11} - \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle^2}{4} + \langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle\langle \mathbf{f}_{21}, \Delta\mathbf{p}\rangle}. \quad (3)$$

Компоненты вектора $\mathbf{f}_{ij} = (f_{ij}^1, f_{ij}^2, \ldots, f_{ij}^n)$ задаются соотношением

$$f_{ij}^k = \left(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial p_k}\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j\right), \quad (4)$$

где производные вычисляются в точке $\mathbf{p}_0$, а $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b}\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i\bar{b}_i$ – скалярное произведение векторов в C^n. В выражении (3) опущены слагаемые порядка $o(\|\Delta\mathbf{p}\|)$ и $o(\|\Delta\mathbf{p}\|^2)$ вне и под знаком квадратного корня соответственно. Поскольку $\mathbf{A}$ – эрмитова матрица, векторы $\mathbf{f}_{11}$ и $\mathbf{f}_{22}$ – вещественные, а векторы $\mathbf{f}_{12} = \bar{\mathbf{f}}_{21}$ – комплексно-сопряженные. Асимптотические выражения, дающие приближение нулевого порядка для собственных векторов $\mathbf{u}_\pm$, отвечающих собственным значениям $\lambda_\pm$, имеют вид [10]

$$\mathbf{u}_\pm = \alpha_\pm\mathbf{u}_1 + \beta_\pm\mathbf{u}_2,$$
$$\frac{\alpha_\pm}{\beta_\pm} = \frac{\langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle}{\lambda_\pm - \lambda_0 - \langle \mathbf{f}_{11}, \Delta\mathbf{p}\rangle} = \frac{\lambda_\pm - \lambda_0 - \langle \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle}{\langle \mathbf{f}_{21}, \Delta\mathbf{p}\rangle}. \quad (5)$$

Рассмотрим теперь произвольное комплексное возмущение семейства матриц $\mathbf{A}(\mathbf{p}) + \Delta\mathbf{A}(\mathbf{p})$. Такого рода возмущения возникают вследствие неконсервативных эффектов, например, диссипации, нарушающих эрмитовость невозмущенной задачи [9]. Предположим, что величина возмущения $\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p}) \sim \varepsilon$ мала, где $\varepsilon = \|\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p}_0)\|$ – норма возмущения, вычисленная в диаболической точке. Поведение собственных значений $\lambda_\pm$ для малых $\Delta\mathbf{p}$ и ε описывается асимптотическими выражения [10]

$$\left(\lambda_\pm - \lambda_0 - \frac{\langle \mathbf{f}_{11} + \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle}{2} - \frac{\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}}{2}\right)^2 = \frac{(\langle \mathbf{f}_{11} - \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle + \varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2}{4} + (\langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle + \varepsilon_{12})(\langle \mathbf{f}_{21}, \Delta\mathbf{p}\rangle + \varepsilon_{21}). \quad (6)$$

Величины ε_{ij} – малые комплексные числа порядка ε, определенные соотношениями

$$\varepsilon_{ij} = (\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j). \quad (7)$$

Малая вариация семейства матриц дает поправку к асимптотической формуле для собственные векторов: $\mathbf{u}_\pm = \alpha_\pm^\varepsilon\mathbf{u}_1 + \beta_\pm^\varepsilon\mathbf{u}_2$, где

$$\frac{\alpha_\pm^\varepsilon}{\beta_\pm^\varepsilon} = \frac{\langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle + \varepsilon_{12}}{\lambda_\pm - \lambda_0 - \langle \mathbf{f}_{11}, \Delta\mathbf{p}\rangle - \varepsilon_{11}} = \frac{\lambda_\pm - \lambda_0 - \langle \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle - \varepsilon_{22}}{\langle \mathbf{f}_{21}, \Delta\mathbf{p}\rangle + \varepsilon_{21}}. \quad (8)$$

Отметим, что $\alpha_+^\varepsilon/\beta_+^\varepsilon = \alpha_-^\varepsilon/\beta_-^\varepsilon$ в точке слияния собственных значений $\lambda_+ = \lambda_-$. Таким образом, в этой точке собственные векторы $\mathbf{u}_+ = \mathbf{u}_-$ совпадают и возникает жорданова клетка.

2. Предположим, что $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ является n-параметрическим семейством вещественных симметрических матриц. В этом случае векторы $\mathbf{f}_{11}$, $\mathbf{f}_{22}$ и $\mathbf{f}_{12} = \mathbf{f}_{21}$ – вещественные. Тогда уравнение (3) принимает вид

$$\left(\lambda_\pm - \lambda_0 - \frac{\langle \mathbf{f}_{11} + \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle}{2}\right)^2 - \frac{\langle \mathbf{f}_{11} - \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle^2}{4} = \langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle^2. \quad (9)$$

Уравнение (9) описывает поверхность в пространстве $(p_1, p_2, \ldots, p_n, \lambda)$, состоящую из двух листов $\lambda_+(\mathbf{p})$ и $\lambda_-(\mathbf{p})$. Для двухпараметрической матрицы $\mathbf{A}(p_1, p_2)$ уравнение (9) определяет конус с вершиной в точке $(\mathbf{p}_0, \lambda_0)$ в пространстве (p_1, p_2, λ) [1, 2].

Рассмотрим возмущение $\mathbf{A}(\mathbf{p}) + \Delta\mathbf{A}(\mathbf{p})$ вещественного симметрического семейства $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ в окрестности диаболической точки $\mathbf{p}_0$, где $\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p})$ – комплексная матрица с малой нормой $\varepsilon = \|\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p}_0)\|$. Расщепление двукратного собственного значения λ_0 при изменении вектора параметров $\Delta\mathbf{p}$ и малом комплексном возмущении $\Delta\mathbf{A}$ описывается уравнением (6), принимающим вид

$$\lambda_\pm = \lambda_0' + \mu \pm \sqrt{c}, \quad c = (x+\xi)^2 + (y+\eta)^2 - \zeta^2. \quad (10)$$

В уравнении (10) величины λ_0', x и y являются вещественными:

$$\lambda_0' = \lambda_0 + \frac{1}{2}\langle \mathbf{f}_{11} + \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle, \quad x = \frac{1}{2}\langle \mathbf{f}_{11} - \mathbf{f}_{22}, \Delta\mathbf{p}\rangle, \quad y = \langle \mathbf{f}_{12}, \Delta\mathbf{p}\rangle, \quad (11)$$

тогда как малые коэффициенты μ, ξ, η и ζ – комплексные:

$$\mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}), \quad \xi = \frac{1}{2}(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}), \quad \eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{21}), \quad \zeta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21}). \quad (12)$$

Из уравнение (10) и (11) следуют выражения для вещественной и мнимой частей возмущенных собственных значений

$$\mathrm{Re}\lambda_{\pm} = \lambda_0' + \mathrm{Re}\mu \pm \sqrt{\frac{1}{2}(\mathrm{Re}c + \sqrt{\mathrm{Re}^2c + \mathrm{Im}^2c})}, \quad (13)$$

$$\mathrm{Im}\lambda_{\pm} = \mathrm{Im}\mu \pm \sqrt{\frac{1}{2}(-\mathrm{Re}c + \sqrt{\mathrm{Re}^2c + \mathrm{Im}^2c})}. \quad (14)$$

Уравнения (13) и (14) определяют поверхности в пространствах $(p_1, p_2, \ldots, p_n, \mathrm{Re}\lambda)$ и $(p_1, p_2, \ldots, p_n, \mathrm{Im}\lambda)$. Два листа поверхности (13) соединяются $(\mathrm{Re}\lambda_+ = \mathrm{Re}\lambda_-)$ в точках, удовлетворяющих условиям

$$\mathrm{Re}c \le 0, \quad \mathrm{Im}c = 0, \quad \mathrm{Re}\lambda_{\pm} = \lambda_0' + \mathrm{Re}\mu, \quad (15)$$

тогда как листы $\mathrm{Im}\lambda_+(\mathbf{p})$ и $\mathrm{Im}\lambda_-(\mathbf{p})$ соединяются в точках множества

$$\mathrm{Re}c \ge 0, \quad \mathrm{Im}c = 0, \quad \mathrm{Im}\lambda_{\pm} = \mathrm{Im}\mu. \quad (16)$$

Собственные значения остаются двукратными при возмущении параметров при условии $c = 0$, что дает два уравнения $\mathrm{Re}c = 0$ и $\mathrm{Im}c = 0$. В зависимости от знака величины

$$D = \mathrm{Im}^2\zeta + \mathrm{Im}^2\eta - \mathrm{Im}^2\zeta \quad (17)$$

можно выделить два случая. При $D > 0$ уравнения $\mathrm{Re}c = 0$ и $\mathrm{Im}c = 0$ имеют два решения (x_a, y_a) и (x_b, y_b):

$$x_{a,b} = -\mathrm{Re}\xi + \frac{\mathrm{Im}\xi\mathrm{Re}\zeta\mathrm{Im}\zeta}{\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta} \pm \\ \pm \frac{\mathrm{Im}\eta\sqrt{(\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta + \mathrm{Re}^2\zeta)D}}{\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta}, \quad (18)$$

$$y_{a,b} = -\mathrm{Re}\eta + \frac{\mathrm{Im}\eta\mathrm{Re}\zeta\mathrm{Im}\zeta}{\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta} \mp \\ \mp \frac{\mathrm{Im}\xi\sqrt{(\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta + \mathrm{Re}^2\zeta)D}}{\mathrm{Im}^2\xi + \mathrm{Im}^2\eta}. \quad (19)$$

Эти решения определяют точки в пространстве параметров, где появляются двукратные собственные значения. При $D = 0$ решения совпадают. При $D < 0$ у уравнений $\mathrm{Re}c = 0$ и $\mathrm{Im}c = 0$ нет вещественных решений. В этом случае собственные значения λ_+ и λ_- различны при всех $\Delta\mathbf{p}$.

Заметим, что величины $\mathrm{Im}\xi$ и $\mathrm{Im}\eta$ выражаются через антиэрмитову компоненту $\Delta\mathbf{A}_N = \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{A} - \overline{\Delta\mathbf{A}}^T)$ матрицы $\Delta\mathbf{A}$:

$$\mathrm{Im}\xi = \frac{(\Delta\mathbf{A}_N(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) - (\Delta\mathbf{A}_N(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2)}{2i}, \\ \mathrm{Im}\eta = \frac{(\Delta\mathbf{A}_N(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + (\Delta\mathbf{A}_N(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1)}{2i}, \quad (20)$$

тогда как $\mathrm{Im}\zeta$ зависит от эрмитовой компоненты $\Delta\mathbf{A}_H = \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{A} + \overline{\Delta\mathbf{A}}^T)$:

$$\mathrm{Im}\zeta = \frac{(\Delta\mathbf{A}_H(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) - (\Delta\mathbf{A}_H(\mathbf{p}_0)\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1)}{2i}. \quad (21)$$

В случае $D > 0$ можно сказать, что влияние антиэрмитовой части возмущения $\Delta\mathbf{A}$ сильнее, чем эрмитовой части. Если эрмитова часть превалирует в возмущении $\Delta\mathbf{A}$, то $D < 0$. В частности, $D = -\mathrm{Im}^2\zeta < 0$ для чисто эрмитового возмущения $\Delta\mathbf{A}$.

Предположим, что вектор $\mathbf{p}$ состоит лишь из двух компонент p_1 и p_2, и рассмотрим поверхности (13) и (14) для различных типов возмущения $\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p})$. Сначала рассмотрим случай $D < 0$. Тогда поверхности собственных значений $\mathrm{Re}\lambda_+(\mathbf{p})$ и $\mathrm{Re}\lambda_-(\mathbf{p})$ не пересекаются (рис. 1а). Уравнение $\mathrm{Im}c = 0$ определяет линию на плоскости параметров. В соответствии с условиями (16) листы $\mathrm{Im}\lambda_+(\mathbf{p})$ и $\mathrm{Im}\lambda_-(\mathbf{p})$ поверхностей собственных значений (14) пересекаются вдоль линии

$$\frac{1}{2}\mathrm{Im}c = (x + \mathrm{Re}\xi)\mathrm{Im}\xi + (y + \mathrm{Re}\eta)\mathrm{Im}\eta - \\ -\mathrm{Re}\zeta\mathrm{Im}\zeta = 0, \quad \mathrm{Im}\lambda_{\pm} = \mathrm{Im}\mu. \quad (22)$$

В случае $D > 0$ на линии $\mathrm{Im}c = 0$ существуют точки $\mathbf{p}_a$ и $\mathbf{p}_b$, где собственные векторы совпадают. Координаты этих точек находятся из уравнений (11), где $x = x_{a,b}$ и $y = y_{a,b}$ определяются выражениями (18) и (19). В соответствии с условиями (15) листы вещественных частей собственных значений $\mathrm{Re}\lambda_+(\mathbf{p})$ и $\mathrm{Re}\lambda_-(\mathbf{p})$ соединяются вдоль интервала $[\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b]$ линии

$$\frac{1}{2}\mathrm{Im}c = (x + \mathrm{Re}\xi)\mathrm{Im}\xi + (y + \mathrm{Re}\eta)\mathrm{Im}\eta - \\ -\mathrm{Re}\zeta\mathrm{Im}\zeta = 0, \quad \mathrm{Im}\lambda_{\pm} = \lambda_0' + \mathrm{Re}\mu. \quad (23)$$

Особенность поверхности вещественных частей собственных значений, описываемая уравнением (13) при $D > 0$, называется “кофейным фильтром” [8]. Деформация конической особенности в кофейный фильтр показана на рис. 1б. Заметим, что в оптике и акустике кристаллов интервал $[\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b]$ называется отрезком ветвления, а точки $\mathbf{p}_a$, $\mathbf{p}_b$ определяют “сингулярные оси”, поскольку в соответствии с уравнением (8) двукратные собственные значения в этих точках имеют лишь по одному собственному вектору [4, 5, 7].

3. Оптические свойства немагнитного кристалла характеризуются обратным диэлектрическим тензором $\boldsymbol{\eta}$, связывающим векторы напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ и индукции $\mathbf{D}$ [4]

$$\mathbf{E} = \boldsymbol{\eta}\mathbf{D}. \quad (24)$$

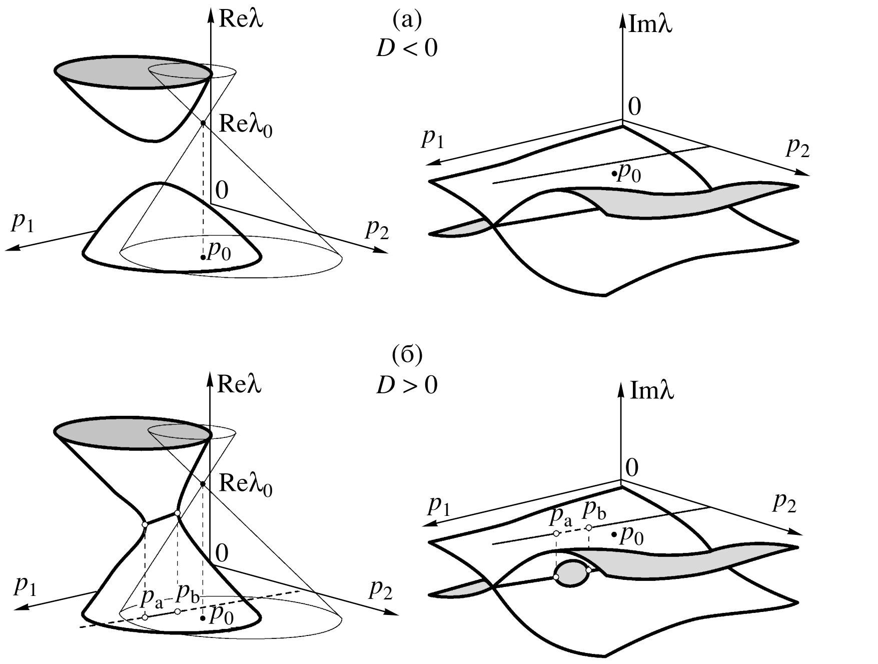

Рис. 1. Распад конической особенности при комплексном возмущении.

В случае монохроматической плоской волны с частотой ω, распространяющейся в направлении $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)$, $\|\mathbf{s}\| = 1$, имеем

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}(\mathbf{s})\exp i\omega\left(\frac{n(\mathbf{s})}{c}\mathbf{s}^T\mathbf{r} - t\right), \tag{25}$$

где $n(\mathbf{s})$ – показатель преломления, а $\mathbf{r}$ – вещественный вектор пространственных координат. С учетом выражения для волны (25) и соотношения (24) уравнения Максвелла преобразуются к виду

$$\boldsymbol{\eta}\mathbf{D}(\mathbf{s}) - \mathbf{s}\mathbf{s}^T\boldsymbol{\eta}\mathbf{D}(\mathbf{s}) = \frac{1}{n^2(\mathbf{s})}\mathbf{D}(\mathbf{s}). \tag{26}$$

Умножая уравнение (26) слева на вектор $\mathbf{s}^T$, найдем, что для плоской волны вектор $\mathbf{D}$ всегда ортогонален вектору направления $\mathbf{s}$, т.е. $\mathbf{s}^T\mathbf{D}(\mathbf{s}) = 0$. Используя это условие, запишем уравнение (26) в форме задачи на собственные значения

$$[(\mathbf{I} - \mathbf{s}\mathbf{s}^T)\eta(\mathbf{I} - \mathbf{s}\mathbf{s}^T)]\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}, \tag{27}$$

где $\lambda = n^{-2}$, $\mathbf{u} = \mathbf{D}$, а $\mathbf{I}$ – единичная матрица. Поскольку $\mathbf{I} - \mathbf{s}\mathbf{s}^T$ – особая матрица, одно из собственных значений всегда нулевое. Обозначим остальные два собственные значения λ_+ и λ_-. Эти собственные значения определяют показатель преломления n, а соответствующие собственные векторы – поляризацию [4].

Обратные диэлектрический тензор описывается комплексной неэрмитовой матрицей $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}_{transp} + \boldsymbol{\eta}_{dichroic} + \boldsymbol{\eta}_{chiral}$. Симметрическая часть матрицы $\boldsymbol{\eta}$, состоящая из вещественной матрицы $\boldsymbol{\eta}_{transp}$ и мнимой матрицы $\boldsymbol{\eta}_{dichroic}$, образует тензор анизотропии, описывающий двойное лучепреломление кристалла. Для прозрачного кристалла тензор анизотропии вещественный и состоит лишь из матрицы $\boldsymbol{\eta}_{transp}$. Для кристалла с линейным дихроизмом этот тензор представляется комплексной матрицей. Выбирая координатные оси вдоль главных осей $\boldsymbol{\eta}_{transp}$, получим $\boldsymbol{\eta}_{transp} = \mathrm{diag}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$. Матрица

$$\boldsymbol{\eta}_{dishroic} = i\begin{pmatrix} \eta_{11}^d & \eta_{12}^d & \eta_{13}^d \\ \eta_{12}^d & \eta_{22}^d & \eta_{23}^d \\ \eta_{13}^d & \eta_{23}^d & \eta_{33}^d \end{pmatrix} \tag{28}$$

описывает линейный дихроизм (поглощение). Матрица $\boldsymbol{\eta}_{chiral}$ представляет собой антисимметрическую часть $\boldsymbol{\eta}$. Она определяется вектором оптической активности кристалла $\mathbf{g} = (g_1, g_2, g_3)$, который линейно зависит от $\mathbf{s}$:

$$\boldsymbol{\eta}_{chiral} = i\begin{pmatrix} 0 & -g_3 & g_2 \\ g_3 & 0 & -g_1 \\ -g_2 & g_1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{g} = \boldsymbol{\gamma}\mathbf{s} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{12} & \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{13} & \gamma_{23} & \gamma_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix}, \tag{29}$$

где $\boldsymbol{\gamma}$ – симметрический тензор оптической активности [4, 5].

Рассмотрим сначала прозрачный кристалла, когда $\boldsymbol{\eta}_{dichroic} = 0$ и $\boldsymbol{\gamma} = 0$. Тогда матрица

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}) = (\mathbf{I}-\mathbf{ss}^T)\boldsymbol{\eta}_{transp}(\mathbf{I}-\mathbf{ss}^T) \tag{30}$$

является вещественной симметрической и зависит от вектора двух параметров $\mathbf{p} = (s_1, s_2)$. Третья компонента вектора $\mathbf{s}$ выражается как $s_3 = \pm\sqrt{1-s_1^2-s_2^2}$, где случаи двух различных знаков должны быть рассмотрены по отдельности. Ниже предполагается, что $\eta_1 > \eta_2 > \eta_3$. Это соответствует двухосному кристаллу.

Ненулевые собственные значения $\lambda_\pm$ матрицы $\mathbf{A}(\mathbf{p})$ находятся явно и являются одинаковыми для противоположных направлений $\mathbf{s}$ и $-\mathbf{s}$. Собственные значения λ_+ и λ_- совпадают в точках

$$\mathbf{s}_0 = (S_1, 0, S_3)^T, \quad \lambda_0 = \eta_2;$$
$$S_1 = \pm\sqrt{\frac{\eta_1-\eta_2}{\eta_1-\eta_3}}, \quad S_3 = \pm\sqrt{1-S_1^2}, \tag{31}$$

которые определяют четыре диаболические точки (для двух знаков S_1 и S_3), называемые также оптическими осями [4, 5]. Двукратное собственное значение $\lambda_0 = \eta_2$ матрицы $\mathbf{A}_0 = \mathbf{A}(\mathbf{p}_0)$, $\mathbf{p}_0 = (S_1, 0)$ имеет два собственные вектора

$$\mathbf{u}_1 = (0, 1, 0)^T, \quad \mathbf{u}_2 = (S_3, 0, -S_1)^T, \tag{32}$$

удовлетворяющих условиям нормировки (2). Используя выражения (30) и (32), найдем векторы $\mathbf{f}_{ij}$ с компонентами (4) для оптических осей. Подставляя их в (9), получим локальные асимптотические выражения для конических особенностей в пространстве (s_1, s_2, λ), справедливые для каждой из четырех оптических осей (31),

$$(\lambda-\eta_2-(\eta_3-\eta_1)S_1(s_1-S_1))^2 =$$
$$= (\eta_3-\eta_1)^2S_1^2((s_1-S_1)^2+S_3^2s_2^2). \tag{33}$$

Теперь предположим, что кристалл обладает поглощением и оптической активностью. Тогда можно считать, что семейство матриц (30) подвергается комплексному возмущению $\mathbf{A}(\mathbf{p}) + \Delta\mathbf{A}(\mathbf{p})$, где

$$\Delta\mathbf{A}(\mathbf{p}) = (\mathbf{I}-\mathbf{ss}^T)(\eta_{dichroic}+\eta_{chiral})(\mathbf{I}-\mathbf{ss}^T). \tag{34}$$

Предположим, что поглощение и оптическая активность являются слабыми, т.е. величина $\varepsilon = \|\boldsymbol{\eta}_{dichroic}\| + \|\boldsymbol{\eta}_{chiral}\|$ мала. Тогда можно использовать полученные выше общие асимптотические формулы для описания перестройки конической особенности поверхностей собственных значений. Для этого необходимо знать лишь значение возмущения $\Delta \boldsymbol{A}$ на оптической оси $\mathbf{s}_0$ прозрачного кристалла. Подставляя матрицу (34), вычисленную на оптической оси (31), в уравнение (7) и затем используя формулы (12), найдем

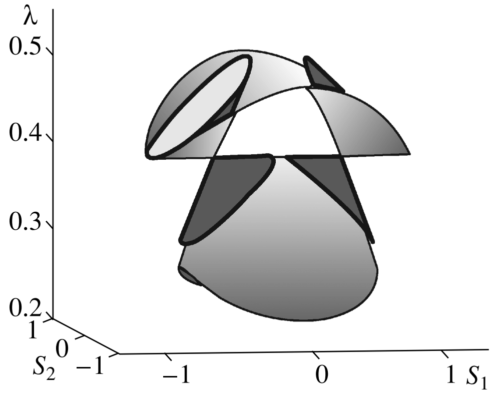

Рис. 2. Конические особенности на оптических осях и их локальные аппроксимации.

$$\mu = \frac{i}{2}(\eta_{22}^d+\eta_{11}^dS_3^2-2\eta_{13}^dS_1S_3+\eta_{33}^dS_1^2),$$
$$\xi = \frac{i}{2}(\eta_{22}^d-\eta_{11}^dS_3^2+2\eta_{13}^dS_1S_3-\eta_{33}^dS_1^2),$$
$$\eta = i(\eta_{12}^dS_3-\eta_{23}^dS_1),$$
$$\zeta = -i(\gamma_{11}S_1^2+2\gamma_{13}S_1S_3+\gamma_{33}S_3^2). \tag{35}$$

Заметим, что μ, ξ и η – чисто мнимые величины, зависящие только от поглощения, а величина ζ – от оптической активности кристалла.

Особенности в кристаллах со слабыми поглощением и оптической активностью изучали в работе [5]. Было показано, что особенность “кофейный фильтр” возникает в кристаллах с преобладанием поглощения, а в кристаллах с доминирующей оптической активностью поверхности вещественных частей собственных значений не пересекаются. Из полученных выше общих результатов следует, что двум этим случаям соответствуют условия $D > 0$ и $D < 0$, где D определена выражением (17).

В качестве численного примера рассмотрим кристалл со слабыми поглощением и оптической активностью, описываемый тензорами (28), (29), которые имеют вид

$$\boldsymbol{\eta}_{dichroic} = \frac{i}{200}\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad \gamma = \frac{1}{200}\begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}. \tag{36}$$

Соответствующий прозрачный кристалл характеризуется величинами $\eta_1 = 0.5$, $\eta_2 = 0.4$, $\eta_3 = 0.1$, и его поверхности собственных значений с двумя оптическими осями показаны на рис. 2 вместе с коническими поверхностями (33). Две оптические

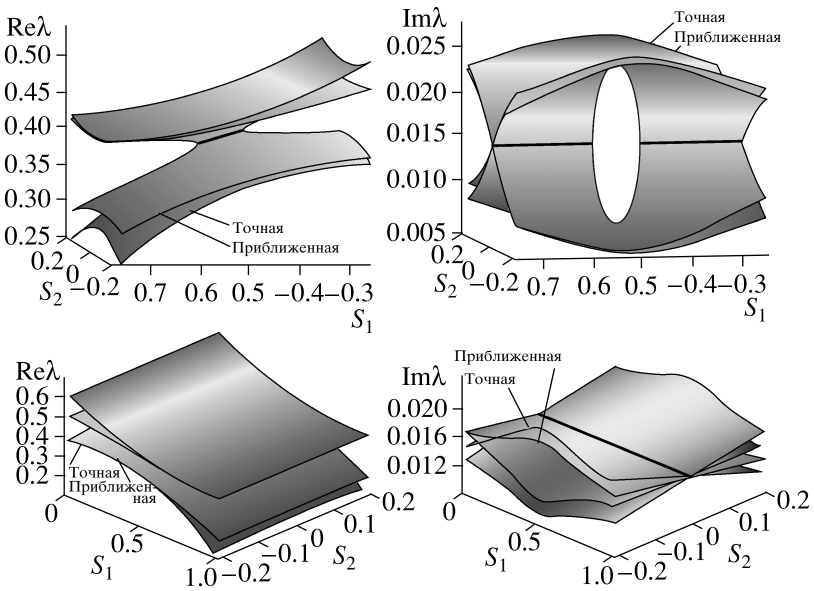

Рис. 3. Поверхности показателей преломления для кристалла со слабыми поглощением и оптической активностью.

оси, показанные на рис. 2, имеют координаты $\mathbf{s}_0 = \left(\pm\frac{1}{2}, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ и отвечают двукратному собственному значению $\lambda_0 = \frac{2}{5}$. Используя выражения (36) в уравнении (35), найдем, что условие $D = \frac{7}{160\,000}(4\sqrt{3} - 5) > 0$ удовлетворяется для левой оптической оси $\mathbf{s}_0 = \left(-\frac{1}{2}, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$. Следовательно, коническая особенность трансформируется в “кофейный фильтр” с двумя сингулярными осями. Локальная аппроксимация этих поверхностей дается уравнениями (13), (14). На правой оптической оси $\mathbf{s}_0 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ удовлетворяется условие $D = -\frac{7}{160\,000}(4\sqrt{3} + 5) < 0$. Таким образом, вещественные части собственных значений не пересекаются при возмущении правой оптической оси. Приближенные и точные поверхности собственных значений показаны на рис. 3, где видно, что асимптотические формулы хорошо описывают особенности поверхностей показателей преломления кристаллов со слабыми поглощением и оптической активностью.

Работа поддержана грантами РФФИ 03–01–00161, CRDF–BRHE Y1–M–06–03 и CRDF–BRHE Y1–MP–06–19.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Von Neumann J., Wigner E.P.* // Zütschr. Phys. 1929. Bd. 30. S. 467–470.
2. *Teller E.* // J. Phys. Chem. 1937. V. 41. № 1. P. 109–116.
3. *Berry M.V., Wilkinson M.* // Proc. Roy. Soc. London. A. 1984. V. 392. P. 15–43.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2003.
5. *Berry M.V., Dennis M.R.* // Proc. Roy. Soc. London. A. 2003. V. 459. P. 1261–1292.
6. *Mondragon A., Hernandez E.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1993. V. 26. P. 5595–5611.
7. *Shuvalov A.L., Scott N.H.* // Acta mech. 2000. V. 140. P. 1–15.
8. *Keck F., Korsch H.J., Mossmann S.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P. 2125–2137.
9. *Berry M.V.* // Czech. J. Phys. 2004. V. 54. P. 1039–1047.
10. *Seyranian A.P., Kirillov O.N., Mailybaev A.A.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2005. V. 38. P. 1723–1740.