

Jak číst Kramersovy – Kronigovy relace

Poznámky k přednáškám
v rámci Semináře z kvantové mechaniky
říjen a listopad 2001

Tento text není uceleným přehledem problematiky Kramersových – Kronigových relací. Představuje pouze soubor poznámek, které vznikaly jako příprava k přednáškám. Tolerantní čtenáře prosím, aby se svou laskavostí zašli ještě dále a upozornili mě na chyby, které objeví. Vítány jsou samozřejmě všechny náměty ke závěrečné kapitole 8.

chaptermark

Obsah

1	O co jde ?	5
1.1	Odrazivost \longrightarrow fáze \longrightarrow koeficient odrazivosti	5
1.2	Index lomu \longleftrightarrow index absorpce, reálná \longleftrightarrow imaginární část dielektrické permitivity	6
1.3	Otázky, které je třeba si položit	6
2	Optická odezva	9
2.1	Lokální synchronní vztah	9
2.2	Lokální nesynchronní vztah	9
2.3	Nelokální nesynchronní vztah	10
3	Základní vlastnosti funkcí komplexní proměnné	13
3.1	Holomorfní funkce	13
3.2	Meromorfní funkce	16
4	Laplaceova transformace	23
4.1	Jednorozměrná jednostranná Laplaceova transformace	23
4.2	Jednorozměrná dvoustranná Laplaceova transformace	27
4.3	Vícerozměrná Laplaceova transformace	30
4.4	Laplaceova transformace konvoluce	31
5	Laplaceova transformace a odezva	33
5.1	Úplná Laplaceova transformace Maxwellových rovnic	33
5.2	Částečná Laplaceova transformace Maxwellových rovnic	35
5.3	Jak získat komplexní funkce reálným experimentem?	36
6	Kramersovy–Kronigovy relace	39
6.1	Kramersovy – Kronigovy relace pro dielektrickou permitivitu	39
6.2	Kramersovy–Kronigovy relace pro derivace	44
6.3	Kramersovy–Kronigovy relace pro koeficient odrazivosti	45

OBSAH

6.4	Kramersovy–Kronigovy relace pro index lomu	49
6.5	Extrapolace experimentálních dat	50
7	Fyzikální aplikace	53
7.1	Klasický mikroskopický model	53
7.2	Plazmony	56
8	Otevřené problémy	59
8.1	Nutné a postačující podmínky pro Kramersovy – Kronigovy relace	59
8.2	Co s kořeny komplexní permitivity v horní polorovině?	61
8.3	Přispějte k diskusi	62

Kapitola 1

O co jde ?

Při studiu optických vlastností pevných látek jsou Kramersovy — Kronigovy relace používány velmi často. Veličiny, které v nich vystupují, mají fyzikální význam související s problematikou optické odezvy. Nejčastěji se s nimi setkáme v některém z následujících tvarů:

1.1 Odrazivost \rightarrow fáze \rightarrow koeficient odrazivosti

Nejčastěji měřenou veličinou při studiu optických vlastností látek je odrazivost R . Její spektrální závislost $R(\omega)$ je v podstatě přímým výsledkem experimentu a umožňuje snadno určit modul (komplexního) koeficientu odrazivosti \tilde{r}

$$\tilde{r}(\omega) = \varrho(\omega) \exp i\theta(\omega). \quad (1.1)$$

Platí

$$R(\omega) = \varrho^2(\omega) = |\tilde{r}(\omega)|^2 \quad (1.2)$$

Fázi $\theta(\omega)$ zřejmě z měření odrazivosti určit nelze. Při znalosti R pro jednotlivé hodnoty frekvence skutečně nikoli. Je-li však k dispozici spektrální závislost $R(\omega)$ v dostatečně velkém rozsahu frekvencí, lze použít Kramersovy — Kronigovy relace představující integrální vztah mezi spektry $R(\omega)$ a $\theta(\omega)$,

$$\theta(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln [R(x)/R(\omega)]}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (1.3)$$

Tento vztah vyplývá z relací

$$\theta(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln \varrho(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad \ln \varrho(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \theta(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad \omega > 0. \quad (1.4)$$

Na základě znalosti průběhu $\varrho(\omega)$ a $\theta(\omega)$ již pak určíme komplexní index lomu $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$, například při kolmém dopadu, velmi jednoduše

$$\tilde{r}(\omega) = \varrho(\omega) \exp i\theta(\omega) = \frac{n(\omega) + ik(\omega) - 1}{n(\omega) + ik(\omega) + 1} \quad (1.5)$$

a odpovídající dielektrickou funkci (relativní permitivitu) $\tilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = [\tilde{n}(\omega)]^2. \quad (1.6)$$

1.2 Index lomu \longleftrightarrow index absorpce, reálná \longleftrightarrow imaginární část dielektrické permitivity

Kramersovy – Kronigovy vztahy (1.4), používané bezprostředně při zpracování výsledků odrazivostních experimentů, poslouží pro výpočet reálné a imaginární části komplexní relativní dielektrické permitivity $\tilde{\varepsilon}(\omega)$. Pro tuto funkci samotnou však rovněž platí Kramersovy – Kronigovy relace, a to ve tvaru

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{x \varepsilon_2(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad \varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(x)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (1.7)$$

Velmi často se setkáme s týmiž vztahy pro komplexní index lomu,

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{x k(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad k(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{n(x)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (1.8)$$

1.3 Otázky, které je třeba si položit

Nechceme-li se vztahy (1.3–1.4) nebo (1.7–1.8) pracovat pouze formálně, měli bychom si položit celou řadu otázek:

- Dielektrická permitivita a index lomu jsou typické materiálové charakteristiky. Jak mohou být komplexní?
- Odkud vyplývá závislost materiálových charakteristik na frekvenci?
- Co se rozumí „dostatečně velkým rozsahem frekvencí“, v němž je třeba znát spektrum $R(\omega)$, abychom mohli použít vztahů pro výpočet fáze $\theta(\omega)$? Meze integrálu jsou přece 0 a ∞ .
- Jak to, že veličiny $\rho(\omega)$ a $\theta(\omega)$, resp. $n(\omega)$ a $k(\omega)$, resp. $\varepsilon_1(\omega)$ a $\varepsilon_2(\omega)$ nejsou nezávislé, ale souvisejí spolu prostřednictvím uvedených integrálních vztahů?
- Jaké podmínky mají být splněny, aby integrály mohly být počítány „obyčejně“, bez zdůraznění hlavní hodnoty ?
- Vztahy (1.4), (1.7) a (1.8), které jsme nazvali Kramersovými – Kronigovými relacemi, mají pro komplexní veličiny $\ln \tilde{r}(\omega)$, $\tilde{n}(\omega)$ a $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ shodný tvar. Na druhé straně jsou tyto veličiny vázány (z fyzikálních důvodů) vztahy (1.5–1.6). Není v tom rozpor?

KAPITOLA 1. O CO JDE ?

Kapitola 2

Optická odezva

Odezvu látky na elektrické pole o intenzitě $\vec{E}(\vec{r}, t)$ (podnět) lze charakterizovat pomocí elektrické indukce $\vec{D}(\vec{r}, t)$, nebo pomocí polarizace $\vec{P}(\vec{r}, t)$. Optickou odezvu lze popsat různými typy lineárního vztahu mezi podnětem a odezvou, zprostředkovaného odezвовou funkcí.

2.1 Lokální synchronní vztah

Lokálnost a synchronnost odezвовého vztahu znamená, že hodnota odezvy v daném okamžiku a daném bodě prostoru je dána výhradně hodnotami podnětu a odezвовé funkce v tomtéž okamžiku a v tomtéž bodě prostoru.

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0(1 + \alpha(\vec{r}, t))\vec{E}(\vec{r}, t), \quad \vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0\alpha(\vec{r}, t)\vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0(1 + \alpha(t))\vec{E}(\vec{r}, t), \quad \vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0\alpha(t)\vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.2)$$

přičemž vztah (2.1) platí pro nehomogenní a (2.2) pro homogenní prostředí. Veličiny $\varepsilon_0\alpha$, α a $\varepsilon = 1 + \alpha$ představují polarizovatelnost, relativní polarizovatelnost (relativní dielektrickou susceptibilitu) a relativní dielektrickou permisivitu.

2.2 Lokální nesynchronní vztah

V tomto případě závisí hodnota odezvy v daném okamžiku a daném bodě prostoru na hodnotách podnětu a odezвовé funkce ve všech okamžicích minulých, avšak v tomtéž bodě prostoru.

$$\begin{aligned}\vec{D}(\vec{r}, t) &= \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_{-\infty}^t \alpha(\vec{r}, t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = \\ &= \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\vec{r}, \tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) d\tau,\end{aligned}\quad (2.3)$$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^t \alpha(\vec{r}, t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\vec{r}, \tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) d\tau, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned}\vec{D}(\vec{r}, t) &= \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_{-\infty}^t \alpha(t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = \\ &= \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) d\tau,\end{aligned}\quad (2.5)$$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^t \alpha(t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) d\tau. \quad (2.6)$$

První dvojice vztahů, tj. (2.3) a (2.4), platí pro nehomogenní prostředí a druhá, tj. (2.5) a (2.6), pro prostředí homogenní. O lokálních vztazích se také hovoří jako o situaci bez prostorové disperze. Integrace přes minulost okamžiku t vyjadřuje příčinnost odezvového vztahu. Odezovou funkcí je polarizovatelnost $\varepsilon_0 \alpha(\vec{r}, t - t')$, resp. $\varepsilon_0 \alpha(t - t')$, případně relativní polarizovatelnost $\alpha(\vec{r}, t - t')$, resp. $\alpha(t - t')$. Dielektrickou permitivitu tyto vztahy nedefinují.

2.3 Nelokální nesynchronní vztah

Následující vztahy představují nejobecnější situaci, kdy hodnota odezvy v daném okamžiku a daném bodě prostoru závisí na hodnotách podnětu a odezvové funkce ve všech minulých okamžicích (příčinnost) a ve všech bodech prostoru.

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_{\mathcal{K}} \alpha(\vec{r}, \vec{r}' - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') dt' d^3 r', \quad (2.7)$$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int_{\mathcal{K}} \alpha(\vec{r}, \vec{r}' - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') dt' d^3 r', \quad (2.8)$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon_0 \int_{\mathcal{K}} \alpha(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') dt' d^3 r', \quad (2.9)$$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int_{\mathcal{K}} \alpha(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') dt' d^3 r', \quad (2.10)$$

opět pro nehomogenní resp. homogenní prostředí. Integračním oborem \mathcal{K} čtyřnásobného integrálu je časoprostorový kužel odpovídající minulosti události (\vec{r}, t) . Volba integračního oboru respektuje příčinnost odezvového vztahu.

KAPITOLA 2. OPTICKÁ ODEZVA

Kapitola 3

Základní vlastnosti funkcí komplexní proměnné

Abychom odpověděli na otázky z odstavce 1.3, je třeba, abychom si oživilí některé znalosti základů teorie funkcí komplexní proměnné.

3.1 Holomorfní funkce

Zopakujme stručně definice základních pojmů: *Funkcí komplexní proměnné* $F(z)$ rozumíme jakoukoli relaci na množině komplexních čísel \mathbf{C} . Funkce se nazývá *jednoznačná*, je-li tato relace zobrazením. Jednoznačná funkce $\phi(z)$ se nazývá *jednoznačnou větví* funkce $F(z)$, jestliže pro každé $z \in D_F$ platí $\phi(z) \in F(z)$. Dále uvažujme jednoznačné funkce až do odvolání. Jednoznačná funkce $F(z)$ se nazývá *holomorfní* na otevřené množině $D \subset D_f$, existuje-li pro každé $z \in D$ její *derivate*, tj. limita

$$\lim_{w \rightarrow z} \frac{F(w) - F(z)}{w - z}. \quad (3.1)$$

Funkce $F(z)$ se nazývá *regulární* na D , jestliže ke každému bodu $z \in D$ existuje otevřené kruhové okolí bodu z tvaru $B(z, r) = \{w \in \mathbf{C} \mid 0 < |w - z| < r\}$ tak, že v něm platí

$$F(w) = F(z) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (w - z)^n, \quad (3.2)$$

přičemž řada konverguje absolutně a stejnoměrně.

Věta 3.1: Nechť $D \subset \mathbf{C}$ je otevřená množina. Funkce $F(z)$, kde $z = x + iy$, je na D holomorfní právě tehdy, jsou-li funkce $u(x, y) = \operatorname{Re} F(z)$ a $v(x, y) = \operatorname{Im} F(z)$ na D diferencovatelné a platí *Cauchyovy–Riemannovy podmínky*

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial v(x, y)}{\partial y}, \quad \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = -\frac{\partial v(x, y)}{\partial x}. \quad (3.3)$$

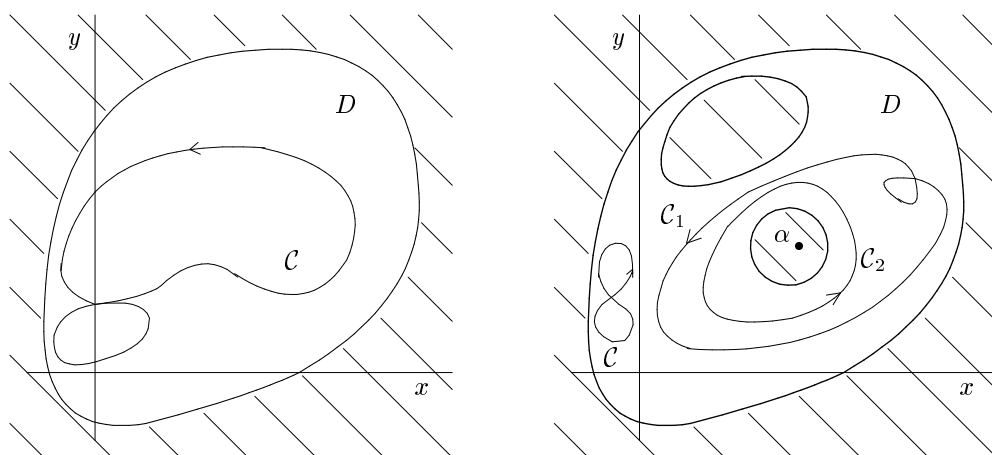
Poznamenejme, že derivaci $F'(z)$ holomorfní funkce $F(z)$ lze vyjádřit vztahem

$$F'(z) = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + i \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} - i \frac{\partial u(x, y)}{\partial y}.$$

V dalším budeme označovat Γ množinu po částech hladkých, rektifikovatelných, uzavřených křivek v \mathbf{C} .

Věta 3.2 Cauchyova lokální: Nechť $F(z)$ je holomorfní na konvexní otevřené množině D . Nechť $\mathcal{C} \in \Gamma$ je po částech hladká, rektifikovatelná, uzavřená křivka v D . Pak

$$\int_{\mathcal{C}} F(z) = 0. \quad (3.4)$$



Obr. 3.1 Lokální a globální Cauchyova věta

Věta 3.3: Funkce $F(z)$ je na D holomorfní právě tehdy, je-li na D regulární.

Pak má funkce v bodech množiny D derivace všech řádů a platí

$$F(w) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F^{(n)}(z)}{n!} (w-z)^n. \quad (3.5)$$

Důležitým důsledkem jsou Cauchyovy vzorce pro vyjádření funkčních hodnot funkce $F(z)$ a jejích derivací:

$$\text{Ind}_{\mathcal{C}}(z) F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \frac{F(w)}{w-z} dw, \quad (3.6)$$

$$\text{Ind}_{\mathcal{C}}(z) F^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \frac{F(w)}{(w-z)^{n+1}} dw, \quad \text{kde}$$

$$\text{Ind}_{\mathcal{C}}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{w-z}$$

představuje *index bodu z vzhledem ke křivce \mathcal{C}* („kolikrát křivka \mathcal{C} obíhá bod z “).

Věta 3.4 Cauchyova globální: Nechť $F(z)$ je holomorfní na otevřené množině D . Nechť $\mathcal{C} \in \Gamma$ je po částech hladká, rektifikovatelná, uzavřená křivka v D . Nechť dále $\text{Ind}_{\mathcal{C}}(\alpha) = 0$ pro všechny body α neležící v D (křivka tyto body „neobíhá“). Pak platí Cauchyova věta i Cauchyovy vzorce. Nechť \mathcal{C}_1 a \mathcal{C}_2 jsou dvě po částech hladké rektifikovatelné a uzavřené křivky v D , takové, že $\text{Ind}_{\mathcal{C}_1}(\alpha) = \text{Ind}_{\mathcal{C}_2}(\alpha)$ pro všechny body $\alpha \notin D$. Pak

$$\int_{\mathcal{C}_1} F(z) dz = \int_{\mathcal{C}_2} F(z) dz. \quad (3.7)$$

K důležitým vlastnostem holomorfních funkcí patří tzv. *věta o jednoznačnosti*, která mj. zaručuje jednoznačnost rozšíření definičního oboru holomorfní funkce, pokud takové rozšíření existuje. Na jejím základě je pak například možné rozšířit definiční obor funkcí z reálné osy nebo z intervalu na reálné ose do jisté oblasti komplexní roviny.

Věta 3.5 o jednoznačnosti: Nechť $F(z)$ je funkce holomorfní v oblasti D . Označme $N_F = \{z \in \mathbf{C} | F(z) = 0\}$ množinu *kořenů* funkce $F(z)$. Pak nastane právě jeden z případů:

1. Funkce $F(z)$ je identicky nulová na D , tj. $N_F = D$. Tento případ nastane právě když má množina N_F v oblasti D alespoň jeden hromadný bod.
2. Všechny body množiny N_F jsou (vzhledem k množině D) izolované. V tomto případě ke každému bodu $z_0 \in D$ existuje přirozené číslo m a okolí $B(z_0, r)$ takové, že v něm platí

$$F(z) = (z - z_0)^m G(z),$$

kde funkce $G(z)$ je holomorfní a $G(z_0) \neq 0$. Číslo m se nazývá *řád kořene* z_0 .

Poznamenejme, že předpoklad o souvislosti množiny D je pro důkaz věty o jednoznačnosti podstatný a nelze jej oslabit.

Nechť $F(z)$ je funkce definovaná na množině $E \subset \mathbf{C}$. Řekneme, že holomorfní funkce $\Phi(z)$ definovaná na oblasti D obsahující množinu E je *holomorfním rozšířením* funkce $F(z)$ na oblast D , je-li $\Phi(z)|_E = F(z)$. Věta o jednoznačnosti dává pro holomorfní rozšíření funkcí triviální, avšak důležitý důsledek:

Věta 3.6: Nechť $\Phi(z)$ je holomorfní rozšíření funkce $F(z)$ z množiny $E \subset D$ na oblast D . Nechť E má v D alespoň jeden hromadný bod. Pak je funkce $\Phi(z)$ je určena jednoznačně.

Příklad 3.1: Nechť $F(x) = e^x$, $E = \mathbf{R}$, $D = \mathbf{C}$. Je zřejmé, že dokonce všechny body množiny E jsou jejími hromadnými body ležícími v \mathbf{C} . Pro $F(x)$ na \mathbf{R} platí

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!},$$

přičemž řada konverguje absolutně a stejnoměrně na \mathbf{R} . Záměnou $x \rightarrow z$ dostaneme řadu konvergující absolutně a stejnoměrně v \mathbf{C} . Tato řada definuje, a to jednoznačně, holomorfní rozšíření exponenciální funkce z reálné osy do celé komplexní roviny.

3.2 Meromorfní funkce

Holomorfnost funkcí v oblasti komplexní roviny může být narušena takzvanými izolovanými singularitami. Nechť $F(z)$ je holomorfní na množině $D \setminus \{z_0\}$, kde

D je otevřená množina, a necht v bodě z_0 nemá $F(z)$ derivaci. Pak se bod z_0 nazývá *izolovanou singularitou* funkce $F(z)$ v množině D . Následující věty klasifikují izolované singularity:

Věta 3.7 o typech singularit: Necht bod z_0 je izolovanou singularitou funkce $F(z)$ v otevřené množině D . Pak nastane právě jeden ze tří případů:

1. Funkci $F(z)$ lze v bodě z_0 dodefinovat tak, aby vznikla funkce holomorfní v D . V tomto případě se singularita nazývá *odstranitelnou*.
2. Existují komplexní čísla c_1, \dots, c_m , kde $c_m \neq 0$ tak, že funkce

$$F(z) - \sum_{k=1}^m \frac{c_k}{(z - z_0)^k}$$

má v bodě z_0 nanejvýš odstranitelnou singularitu. V takovém případě existuje prstencové okolí $P(z_0, r)$ bodu z_0 tak, že v něm platí

$$F(z) = (z - z_0)^m G(z),$$

kde funkce $G(z)$ je holomorfní v kruhovém okolí $B(z_0, r) = P(z_0, r) \cup \{z_0\}$ a $G(z_0) \neq 0$. Bod z_0 se nazývá *pólem* funkce $F(z)$ a číslo m jeho *řádem*.

3. Pro libovolné prstencové okolí $P(z_0, r)$ bodu z_0 je množina $F(P(z_0, r))$ hustá v \mathbf{C} . V tomto případě je z_0 *podstatnou singulartiou* funkce $F(z)$.

Věta 3.8 kritérium klasifikace singularit: Necht z_0 je izolovanou singularitou funkce $F(z)$ v otevřené množině D . Singularita je odstranitelná právě když má $F(z)$ v bodě z_0 konečnou limitu L . Singularita je pól právě když má $F(z)$ v bodě z_0 limitu $L = \infty$. Singularita je podstatná právě když $F(z)$ nemá v bodě z_0 limitu.

Funkce s izolovanými singularitami lze rovněž rozvíjet v absolutně a stejnoměrně konvergentní řady, ty však budou obsahovat členy $(z - z_0)^n$ i pro záporná celočíselná n .

Věta 3.9 Laurentova řada: Necht je funkce $F(z)$ holomorfní v mezikruží $M = \{z \in \mathbf{C} | r < |z - z_0| < R\}$, kde $0 < r < R$. Pak v mezikruží $M' = \{z \in \mathbf{C} | r' < |z - z_0| < R'\}$ pro libovolné $0 < r < r' < R' < R$ platí

$$F(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(z - z_0)^n, \quad (3.8)$$

přičemž řada konverguje absolutně a stejnoměrně.

Řada (3.8) se nazývá *Laurentovou řadou* funkce $F(z)$ se středem v bodě z_0 . Předpokládejme, že funkce $F(z)$ má v bodě z_0 izolovanou singularitu. V mezikruží se středem z_0 , v němž neleží žádná další singularita, se na ni vztahuje předchozí věta. Necht' $\mathcal{K} : z = z_0 + \rho e^{it}$, $t \in [0, 2k\pi]$ je kružnice ležící v tomto mezikruží, celočíselná hodnota k je *index bodu z_0 vzhledem ke křivce \mathcal{K}* . Počítejme integrál (stejnoměrná konvergence řady zaručuje integraci člen po členu)

$$\int_{\mathcal{K}} F(z) dz = \int_{\mathcal{K}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(z - z_0)^n dz = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_0^{2k\pi} i \rho^{n+1} e^{i(n+1)t} dt = 2k\pi i c_{-1}$$

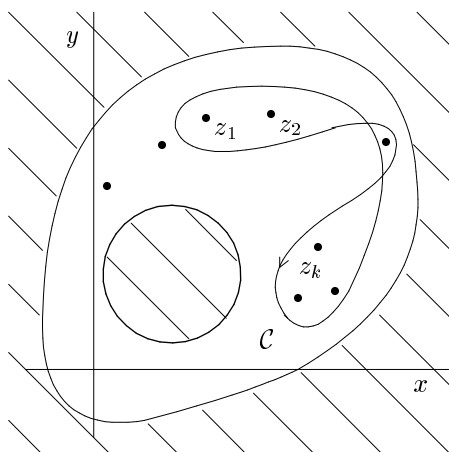
(nenulovou hodnotu má pouze integrál pro $n = -1$). Číslo c_{-1} se nazývá *reziduum* funkce $F(z)$ v bodě z_0 . Je vidět, že integrály po uzavřených křivkách z funkcí se singularitami nejsou nulové, jako tomu bylo u holomorfních funkcí, k jejich nenulovosti přispívají rezidua.

Necht' $F(z)$ je funkce, která má v oblasti D nejvýše spočetně mnoho pólů, které mohou mít hromadné body nanejvýš na hranici oblasti D . Taková funkce se nazývá *meromorfní* v D .

Věta 3.10 o reziduích: Necht' $F(z)$ je meromorfní v D . Necht' $\mathcal{C} \in \Gamma$ je po částech hladká rektifikovatelná a uzavřená křivka ležící v D . Označme $M = \{\xi | \text{Ind}_{\mathcal{C}}(\xi) \neq 0\}$ množinu bodů, obepnutých křivkou \mathcal{C} . Pak platí

$$\int_{\mathcal{C}} F(z) dz = 2\pi i \sum_{z_k \in M} \text{Ind}_{\mathcal{C}}(z_k) \text{rez}(F(z_k)), \quad (3.9)$$

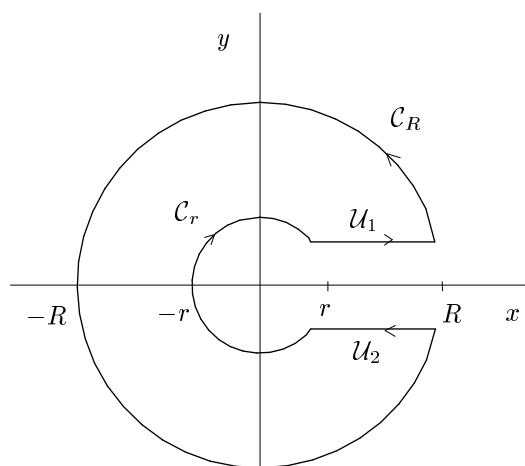
kde z_k jsou póly funkce $f(z)$ ležící v M (těch je pouze konečně mnoho, neboť množina M je kompaktní).



Obr. 3.2 Věta o reziduích

Věta o reziduích platí i pro mnohoznačné funkce s póly, kde je při integraci třeba dát pozor na body větvení.

Příklad 3.2:



Obr. 3.3 K příkladu 3.2

Užitím vlastností mnohoznačných funkcí komplexní proměnné vypočteme, za jistých speciálních předpokladů, reálný integrál

$$I = \int_0^{\infty} x^{\alpha} R(x) dx ,$$

kde $\alpha \in \mathbf{R}$ není celé číslo a $R(x)$ je obecně racionální lomená funkce. Rozšíříme integrand do komplexní roviny, tj. provedeme záměnu $x \rightarrow z$. Funkce $R(z)$ bude meromorfní v \mathbf{C} , funkce z^{α} je obecná mocnina (mnohoznačná funkce). Dále předpokládejme

$$\lim_{z \rightarrow 0} z^{\alpha+1} R(z) = 0 \quad \text{a} \quad \lim_{z \rightarrow \infty} z^{\alpha+1} R(z) = 0 .$$

Zvolíme integrační křivku podle obr. 3.3 a užijeme věty o reziduích. Platí

$$\begin{aligned} & \int_r^R (z^{\alpha})_0 R(z) dz + \int_R^r (z^{\alpha})_{\mathcal{C}_R} R(z) dz + \\ & + \int_{\mathcal{C}_r} z^{\alpha} R(z) dz + \int_{\mathcal{C}_R} z^{\alpha} R(z) dz = 2i\pi \sum_k \operatorname{rez}(z_k^{\alpha} R(z_k)) . \end{aligned}$$

V předchozím vztahu jsou z_k singularity funkce $R(z)$ obepnuté integrační křivkou, $(z^{\alpha})_0$ představuje hlavní větev obecné mocniny z^{α} a $(z^{\alpha})_{\mathcal{C}_R}$ její prodloužení podél křivky \mathcal{C}_R , tj.

$$(z^{\alpha})_{\mathcal{C}_R} = (z^{\alpha})_0 e^{2i\pi\alpha} .$$

Odhadneme-li integrály po křivkách \mathcal{C}_r a \mathcal{C}_R co do absolutní hodnoty a s využitím předpokladů o limitách funkce $z^{\alpha+1} R(z)$, zjistíme, že tyto integrály jdou k nule pro $r \rightarrow 0$ resp. $R \rightarrow \infty$. Odtud

$$(1 - e^{2i\pi\alpha}) \lim_{r \rightarrow 0, R \rightarrow \infty} \int_r^R x^{\alpha} R(x) dx = 2i\pi \sum_k \operatorname{rez}(z_k^{\alpha} R(z_k)) ,$$

$$I = - \frac{\pi}{\sin \pi\alpha} e^{-i\pi\alpha} \sum_k \operatorname{rez}(z_k^{\alpha} R(z_k)) .$$

Přímou praktickou aplikaci tohoto příkladu v oblasti fyziky pevných látek představuje výpočet dielektrické permitivity polovodiče v okolí kritických bodů

sdužené hustoty elektronových stavů odpovídající vodivostnímu a valenčnímu pásu. Provedme takový výpočet pro kritický bod $3DM_0$ (trojdimenzionální minimum). V tomto případě je sdužená hustota stavů v závislosti na frekvenci $\omega' = E'/\hbar$

$$J_{cv}(\omega') \sim (\omega' - \omega_g)^{1/2} \quad \text{pro } \omega' \geq \omega_g \quad \text{a} \quad J_{cv}(\omega') = 0 \quad \text{pro } \omega' < \omega_g.$$

$E_g = \hbar\omega_g$ je energiová šířka zakázaného pásu. Pro permitivitu platí

$$\tilde{\varepsilon} - 1 = \text{konst} \cdot \int_0^{\infty} \frac{J_{cv}(\omega') d\omega'}{\omega'[\omega'^2 - (\omega + i\eta)^2]},$$

kde $\eta > 0$ je tzv. rozšiřovací parametr. Po substituci $\omega' - \omega_g = x$ dostáváme

$$\tilde{\varepsilon}(\omega + i\eta) = \text{konst} \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{(x + \omega_g)[(\omega_g + x)^2 - (\omega + i\eta)^2]}.$$

Dostáváme integrál I z příkladu 3.2 pro hodnotu $\alpha = 1/2$. Singularitami funkce $R(z)$ jsou póly prvního řádu

$$z_1 = -\omega_g + \omega + i\eta, \quad z_2 = -\omega_g - \omega - i\eta, \quad z_3 = -\omega_g.$$

Po výpočtu reziduí dostaneme (K je konstanta)

$$\tilde{\varepsilon} - 1 = K \frac{i\pi}{(\omega + i\eta)^2} \left[-2(-\omega_g)^{1/2} + (-\omega_g + \omega + i\eta)^{1/2} + (-\omega_g - \omega - i\eta)^{1/2} \right].$$

Z odmocnin se berou v úvahu jejich hlavní hodnoty. Při označení

$$\Omega = \frac{\omega_g - \omega}{\eta}, \quad \bar{\Omega} = \frac{\omega_g + \omega}{\eta}$$

nakonec dostaneme pro reálnou a imaginární část funkce $\tilde{\varepsilon}$ vztahy

$$\begin{aligned} \text{Re } \tilde{\varepsilon} - 1 = & \frac{K(\eta/2)^{1/2}}{(\omega^2 - \eta^2)^2} \left[(\omega^2 - \eta^2) \left(2 \left(\frac{2\omega_g}{\eta} \right)^{1/2} - (\Omega + \sqrt{\Omega^2 + 1})^{1/2} - \right. \right. \\ & \left. \left. - (\bar{\Omega} + \sqrt{\bar{\Omega}^2 + 1})^{1/2} \right) + 2\omega\eta \left((-\Omega + \sqrt{\Omega^2 + 1})^{1/2} - (-\bar{\Omega} + \sqrt{\bar{\Omega}^2 + 1})^{1/2} \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \tilde{\varepsilon} = & \frac{K(\eta/2)^{1/2}}{(\omega^2 - \eta^2)^2} \left[(\omega^2 - \eta^2) \left((-\Omega + \sqrt{\Omega^2 + 1})^{1/2} - (-\bar{\Omega} + \sqrt{\bar{\Omega}^2 + 1})^{1/2} \right) - \right. \\ & \left. - 2\omega\eta \left(2 \left(\frac{2\omega_g}{\eta} \right)^{1/2} - (\Omega + \sqrt{\Omega^2 + 1})^{1/2} - (\bar{\Omega} + \sqrt{\bar{\Omega}^2 + 1})^{1/2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Poznámka: Lze ověřit, že funkce $\varepsilon_1(\omega) - 1 = \operatorname{Re} \tilde{\varepsilon}(\omega) - 1$ a $\varepsilon_2(\omega) = \operatorname{Im} \tilde{\varepsilon}(\omega)$ splňují relace (1.7).

Kapitola 4

Laplaceova transformace

Velmi účinným prostředkem pro řešení některých úloh pro funkce reálné proměnné je jejich převedení do komplexního oboru pomocí tzv. Laplaceovy transformace. Laplaceova transformace je integrální transformací definovanou pomocí integrálů v Lebesgueově smyslu. Pro účely této kapitoly uvádíme odpovídající formulace definic a tvrzení pro případ integrace ve smyslu Riemannově.

4.1 Jednorozměrná jednostranná Laplaceova transformace

Nechť $f(t)$ je komplexní funkce reálné proměnné definovaná skoro všude na $t \in (0, \infty)$. Předpokládejme, že nevlastní Riemannův integrál

$$F(z) = \int_0^{\infty} f(t) e^{izt} dt \quad (4.1)$$

konverguje absolutně alespoň pro jedno komplexní číslo z . Funkci $F(z)$ definovanou na množině

$$D_F = \{z \in \mathbf{C} \mid \text{integrál (4.1) konverguje absolutně}\}$$

nazýváme *Laplaceovým obrazem* funkce $f(t)$. Množinu \mathcal{K} všech funkcí $f(t)$ majících shora uvedenou vlastnost nazveme *třídou vzorů* pro Laplaceovu transformaci. Zobrazení

$$\mathcal{L} : \mathcal{K} \ni f(t) \longrightarrow \mathcal{L}(f) = F(z) = \int_0^{\infty} f(t) e^{izt} dt \in \mathcal{L}(\mathcal{K}) \quad (4.2)$$

představuje integrální transformaci zvanou *jednostranná Laplaceova transformace*, funkce $F(z)$ se nazývá *Laplaceovým obrazem* funkce $f(t)$.

Příklad 4.1: Následující příklad ukazuje důležitou podmnožinu třídy vzorů: Nechť $t_0 \geq 0$ a $\zeta_0 \in \mathbf{R}$. Funkce $f(t)$ se nazývá *exponenciálního řádu s indexem růstu ζ_0* , jestliže existuje číslo M tak, že platí

$$|f(t)| \leq M e^{i\zeta_0 t} \quad \text{pro každé } t \geq t_0.$$

Nechť je dále $f(t)$ po částech spojitá. Pak

$$\int_0^B f(t) e^{izt} dt \quad \text{existuje pro všechna } B > 0.$$

Označme dále $z = x + iy$. Nechť $y \geq \zeta_0$. Pak

$$\begin{aligned} |F(z)| &= \left| \int_0^\infty f(t) e^{izt} dt \right| \leq \int_0^\infty |f(t)| |e^{izt}| dt \leq \\ &\leq \int_0^\infty M e^{(\zeta_0 - y)t} dt = M \lim_{B \rightarrow \infty} \left[\frac{e^{(\zeta_0 - y)t}}{\zeta_0 - y} \right]_0^B = \frac{M}{y - \zeta_0}. \end{aligned}$$

Každá po částech spojitá funkce exponenciálního řádu je tedy prvkem třídy vzorů pro Laplaceovu transformaci.

Věta 4.1: Nechť pro $f \in \mathcal{K}$ integrál (4.1) konverguje absolutně v Riemannově smyslu alespoň pro jedno pro číslo $w \in \mathbf{C}$, tj.

$$\int_0^\infty |f(t) e^{iwt}| dt < \infty.$$

Pak existuje právě jedno číslo $\zeta_0 \in \mathbf{R}$ takové, že $F(z)$ konverguje absolutně v polorovině

$$\mathcal{M} = \{z \in \mathbf{C} \mid \operatorname{Im} z > \zeta_0\}$$

a nekonverguje absolutně v jejím doplňku v \mathbf{C} . Funkce $F(z)$ je v polorovině \mathcal{M} holomorfní.

Důkaz: Existence: Provedeme odhady. Označme $z = x + iy$, $w = \xi + i\zeta$. Absolutní konvergence integrálu (4.1) pro číslo $w = \xi + i\zeta$ vede k odhadu

$$\left| \int_0^{\infty} f(t) e^{iwt} dt \right| \leq \int_0^{\infty} |f(t) e^{iwt}| dt = \int_0^{\infty} |f(t)| e^{-\zeta t} dt < \infty.$$

Předpokládejme, že existuje číslo $z_1 = x_1 + iy_1$, pro něž integrál (4.1) nekoverguje absolutně. Pak pro všechna z , pro která $\text{Im } z \leq y_1$ platí

$$\int_0^{\infty} |f(t) e^{izt}| dt = \int_0^{\infty} |f(t) e^{i(x+iy)t}| dt = \int_0^{\infty} |f(t)| e^{-yt} dt \geq \int_0^{\infty} |f(t)| e^{-y_1 t} dt.$$

Množina $\{\text{Im } z \mid \text{integrál (4.1) absolutně konverguje}\}$, je tedy omezená zdola. Její infimum je hledané číslo ζ_0 . Dále předpokládejme $y \geq \zeta_0$. Pak

$$\left| \int_0^{\infty} f(t) e^{izt} dt \right| \leq \int_0^{\infty} |f(t) e^{izt}| dt = \int_0^{\infty} |f(t)| e^{-yt} dt \leq \int_0^{\infty} |f(t)| e^{-\zeta_0 t} dt.$$

Holomorfnost: Holomorfnost funkce $F(z)$ lze dokázat přímým prověřením Cauchyových – Riemannových podmínek.

◇

Důsledek: Funkce $f(t) \in \mathcal{K}$, která je navíc absolutně integrabilní, má Laplaceův obraz holomorfní v celé horní polorovině komplexní roviny.

Z předchozího je zřejmé, že existuje jistá minimální hodnota ζ_0 , tj. Laplaceův obraz existuje pro $\text{Im } z \geq \zeta_0$ a neexistuje pro $\text{Im } z < \zeta_0$.

Věta 4.2 základní vlastnosti Laplaceovy transformace: Necht' $f_i(t) \in \mathcal{K}$ pro $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ a necht' $f(t) \in \mathcal{K}$. Označme $F(z) = \mathcal{L}(f)$ Laplaceův obraz funkce $f(t)$ a $F_i(z) = \mathcal{L}(f_i)$ Laplaceovy obrazy funkcí $f_i(t)$. Pak platí

$$\mathcal{L} \left(\sum_{i=1}^n a_i f_i \right) = \sum_{i=1}^n a_i \mathcal{L}(f_i) = \sum_{i=1}^n a_i F_i, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{L} \left(f(t) e^{iat} \right) = F(a + z), \quad (4.4)$$

$$\frac{d\mathcal{L}(f)}{dz} = \mathcal{L}(it f(t)). \quad (4.5)$$

Pro funkci $f(t)$ spojitou na intervalu $(0, \infty)$ a mající konečnou limitu $f(0_+)$ v nule zprava platí

$$\mathcal{L}(f'(t)) = -iz\mathcal{L}(f) - f(0_+), \quad (4.6)$$

$$\mathcal{L}(f^{(n)}) = (-iz)^n \mathcal{L}(f) + \sum_{j=0}^{n-1} (iz)^{n-j-1} f^{(j)}(0_+). \quad (4.7)$$

Pro funkci nespojitou v bodě $a \in (0, \infty)$ a mající v bodě a limity $f(a_{\pm})$, platí

$$\mathcal{L}(f') = -iz \mathcal{L}(f) - f(0_+) - [f(a_+) - f(a_-)] e^{iaz}. \quad (4.8)$$

Dále je

$$\mathcal{L}\left(\int_a^t f(x) dx\right) = -\frac{\mathcal{L}(f)}{iz} + \frac{1}{iz} \int_0^a f(x) dx. \quad (4.9)$$

Věta 4.3: Nechť $F(z)$ je Laplaceův obraz funkce $f(t)$. Platí vztah pro *inverzní Laplaceovu transformaci*, tzv. *Bromwichův* nebo *Riemannův-Mellinův vzorec*:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{P}} F(z) e^{-izt} dz = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-a+iy_0}^{a+iy_0} F(x+iy_0) e^{y_0 t} \cdot e^{-ix} dx, \quad (4.10)$$

kde integračním oborem \mathcal{P} je libovolná přímka o rovnici $z = x + iy_0$, $x \in \mathbf{R}$, rovnoběžná s reálnou osou a ležící v oblasti holomorfnosti funkce $F(z)$. Problémem je, jak poznat, zda daná funkce $F(z)$ je obrazem nějakého vzoru $f(t) \in \mathcal{K}$. Formulujeme pouze nutné podmínky:

Věta 4.4: Nechť $F(z)$ je Laplaceovým obrazem jistého vzoru z \mathcal{K} . Pak platí:
 (a) Existuje reálné číslo ζ_0 tak, že $F(z)$ je holomorfní v polorovině $\text{Im } z > \zeta_0$.
 (b) Pro každé $\zeta > \zeta_0$ platí

$$\lim_{z \rightarrow \infty, \text{Im } z > \zeta} F(z) = 0.$$

Nutnou podmínkou pro to, aby existovala konečná limita $f(0_+)$ je existence konečné limity

$$\lim_{z \rightarrow \infty, \text{Im } z > k|z|, 0 < k < 1} (zF(z)).$$

Věta 4.5: Racionální lomená funkce $F(z)$ je Laplaceovým obrazem jistého vzoru z \mathcal{K} právě když je stupeň jejího čitatele nižší než stupeň jmenovatele.

Důkaz: Nutnost: Zřejmá z podmínky (b) věty 4.4. Dostatečnost: Rozklad $F(z)$ na parciální zlomky

$$F(z) = \sum_{j=1}^n \frac{A_j}{z - z_j},$$

kde z_1, \dots, z_n jsou kořeny jmenovatele. Platí

$$\frac{A_j}{z - z_j} = \mathcal{L}(-iA_j e^{-iz_j t}).$$

Poznámka k jednoznačnosti vzoru: Různé vzory téhož Laplaceova obrazu se mohou lišit pro $t \in (-\infty, 0)$ a na intervalu $(0, \infty)$ nejvýše na množině nulové míry (Lebesgueovy).

4.2 Jednorozměrná dvoustranná Laplaceova transformace

Rozšíříme úvahy předchozího odstavce na celou reálnou osu \mathbf{R} . Jestliže na \mathbf{R} předpokládáme absolutní Riemannovskou integrabilitu funkce

$$f(t) e^{iwt}$$

pro alespoň dvě komplexní čísla $w_1 = \xi_1 + i\zeta_1$ a $w_2 = \xi_2 + i\zeta_2$, $\zeta_1 \leq \zeta_2$, dostaneme analogické tvrzení jako ve větě 4.1: *Dvoustranný Laplaceův obraz* vzoru $f(t)$

$$F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{izt} dt \quad (4.11)$$

bude holomorfní funkcí proměnné z v pásu $\zeta_2 \leq \text{Im } z \leq \zeta_2$. Existují opět mezní hodnoty $\zeta_m \leq \zeta_1 \leq \zeta_2 \leq \zeta_M$. Pro inverzní transformaci platí obdobně

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{P}} F(z) e^{-izt} dz = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-a+iy_0}^{a+iy_0} F(x + iy_0) e^{y_0} \cdot e^{-ix} dx, \quad (4.12)$$

kde přímka \mathcal{P} leží v pásu holomorfnosti funkce $F(z)$, tj. $\zeta_m < y_0 < \zeta_M$. Zobrazení

$$\tilde{\mathcal{L}} : \tilde{\mathcal{K}} \ni f(t) \longrightarrow \tilde{\mathcal{L}}(f) = F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{izt} dt \in \tilde{\mathcal{L}}(\tilde{\mathcal{K}}) \quad (4.13)$$

se nazývá *dvoustranná Laplaceova transformace*.

Následující tvrzení je užitečné pro praktický výpočet vzoru $f(t)$ ze zadaného Laplaceova obrazu $F(z)$.

Věta 4.6: Nechť funkce $F(z)$ je holomorfní v \mathbf{C} s výjimkou spočetně mnoha pólů z_1, z_2, \dots ležících v polovině $\text{Im } z < K$. Nechť $\{\mathcal{K}_n\}$, $n \rightarrow \infty$, je posloupnost oblouků, z nichž každý protíná přímku $\text{Im } z = K$ v bodech $-R_n + iK$ a $R_n + iK$, $R_1 < R_2 < \dots$, $R_n \rightarrow \infty$ pro $n \rightarrow \infty$. Nechť dále každá z uzavřených křivek $\mathcal{C}_n \in \Gamma$, kde

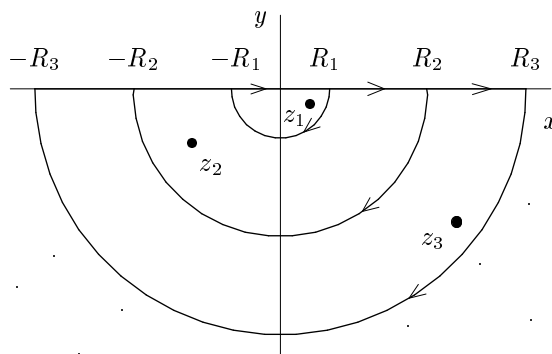
$$\mathcal{C}_n = \mathcal{K}_n + \mathcal{U}_n, \quad \mathcal{U}_n : z = t + iK, t \in [-R_n, R_n]$$

obepíná póly z_1, z_2, \dots, z_n , $n = 1, 2, \dots$, přičemž žádný z nich neleží na \mathcal{K}_n . Je-li

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{K}_n} F(z) e^{-izt} dz = 0,$$

pak

$$f(t) = i \sum_{n=1}^{\infty} \text{rez} \left(F(z) e^{-izt} \right)_{z=z_n}. \quad (4.14)$$



Obr. 4.1 Věta 4.6

Příklad 4.2: Funkce

$$F(z) = -\frac{\omega}{z^2 - \omega^2}, \quad \omega > 0$$

s póly prvního řádu $z_1 = -\omega$ a $z_2 = \omega$ splňuje předpoklady věty 4.6. Skutečně, nechť $K > 0$ je jinak libovolné číslo. Pro oba póly je $\text{Im } z = 0 < K$. Pro $\mathcal{K} : z = R e^{i\varphi}$ platí

$$\begin{aligned} \left| \int_{\mathcal{K}} F(z) e^{-izt} dz \right| &= \left| \int_{-\pi-\varphi_0}^{\varphi_0} -iR \frac{\omega e^{-itR(\cos \varphi + i \sin \varphi)}}{R^2 \left(e^{2i\varphi} - \frac{\omega^2}{R^2} \right)} d\varphi \right| \leq \\ &\leq \int_{-\pi-\varphi_0}^{\varphi_0} \frac{\omega e^{tR \sin \varphi}}{R \left| e^{2i\varphi} - \frac{\omega^2}{R^2} \right|} d\varphi = \frac{\omega}{R} \int_{-\pi-\varphi_0}^{\varphi_0} \frac{e^{tR \sin \varphi}}{\left| e^{2i\varphi} - \frac{\omega^2}{R^2} \right|} d\varphi \rightarrow 0. \end{aligned}$$

(Pro $R \rightarrow \infty$ je totiž $\varphi_0 \rightarrow 0$, meze integrálu jdou k $-\pi$ resp. k 0 a v intervalu $[-\pi, 0]$ je $\sin \varphi \leq 0$. Pro zcela korektní zdůvodnění by bylo třeba integrál pro dané R rozdělit na součet integrálů I_1, I_2 a I_3 v mezích $[-(\pi + \varphi_0), -\pi]$, $[-\pi, 0]$ a $[0, \varphi_0]$ a ukázat, že i $I_1 \rightarrow 0$ a $I_3 \rightarrow 0$ pro $R \rightarrow \infty$, přestože v intervalech mezi těchto integrálů je $\sin \varphi \geq 0$.) Pak tedy

$$\begin{aligned} f(t) &= \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-a+iK}^{a+iK} -\frac{\omega}{z^2 - \omega^2} e^{-izt} dz = \\ &= i \left[\text{rez} \left(\frac{\omega}{z^2 - \omega^2} e^{-izt} \right)_{z=-\omega} + \text{rez} \left(\frac{\omega}{z^2 - \omega^2} e^{-izt} \right)_{z=\omega} \right] = -\frac{i}{2} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) = \sin \omega t. \end{aligned}$$

Poznámka: Předpokládejme, že pás konvergence dvoustranného Laplaceova obrazu $F(z)$ funkce $f(t)$ obsahuje reálnou osu, tj. $\zeta_m < 0$ a $\zeta_M > 0$. Pak

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{ixt} dx$$

představuje *Fourierovu transformaci* funkce $f(t)$.

4.3 Vícerozměrná Laplaceova transformace

Nechť je komplexní funkce $f(t_1, \dots, t_n)$ n reálných proměnných absolutně integrabilní na \mathbf{R}^n , tj. integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} |f(t_1, \dots, t_n)| dt_1 \dots dt_n$$

je konečné číslo. Označme

$$F(z_1, \dots, z_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(t_1, \dots, t_n) e^{iz_1 t_1 + \cdots + iz_n t_n} dt_1 \dots dt_n \quad (4.15)$$

kde z_1, \dots, z_n jsou komplexní proměnné. Vztah (4.15) definuje *vícerozměrný Laplaceův integrál* funkce $f(t_1, \dots, t_n)$. Zobrazení

$$\mathcal{L} : f(t_1, \dots, t_n) \longrightarrow \mathcal{L}(f) = F(z_1, \dots, z_n), \quad (4.16)$$

přiřazující funkci f její Laplaceův integrál, se nazývá vícerozměrná Laplaceova transformace. Vztah pro inverzní transformaci:

$$\begin{aligned} f(t_1, \dots, t_n) &= \\ &= \lim_{a_j \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-a_1 + iK_1}^{a_1 + iK_1} \cdots \int_{-a_n + iK_n}^{a_n + iK_n} F(z_1, \dots, z_n) e^{-i(z_1 t_1 + \cdots + z_n t_n)} dz_1 \dots dz_n. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Pro Laplaceovy obrazy parciálních derivací spojitě funkce platí, opět analogicky jako v jednorozměrném případě,

$$\mathcal{L} \left(\frac{\partial f}{\partial t_j} \right) = -iz_j \mathcal{L}(f). \quad (4.18)$$

4.4 Laplaceova transformace konvoluce

Nechť jsou funkce $f(t)$, $g(t)$, $h(t)$ prvky \mathcal{K} , tj. existují jejich jednostranné Laplaceovy obrazy $F(z) = \mathcal{L}(f)$, $G(z) = \mathcal{L}(g)$ a $H = \mathcal{L}(h)$. Řekneme, že funkce $h(t)$ je *konvolucí* funkcí $f(t)$ a $g(t)$, jestliže platí

$$h(t) = \int_0^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau. \quad (4.19)$$

Pro Laplaceovy obrazy pak dostáváme

$$\begin{aligned} H(z) &= \int_0^{\infty} h(t) e^{izt} dt = \int_0^{\infty} \left(\int_0^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau \right) e^{izt} dt = \\ &= \left(\int_0^{\infty} f(\tau) e^{iz\tau} d\tau \right) \cdot \int_0^{\infty} g(t - \tau) e^{iz(t-\tau)} d(t - \tau) \Rightarrow \\ &\Rightarrow H(z) = F(z)G(z). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Uvažme konvoluci funkcí f a g pro obecný případ dvoustranné Laplaceovy transformace funkcí více proměnných:

$$h(t_1, \dots, t_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau_1, \dots, \tau_n) g(t_1 - \tau_1, \dots, t_n - \tau_n) dt_1 \dots dt_n. \quad (4.21)$$

Postupem analogickým jako v případě jednorozměrné Laplaceovy transformace a užitím Fubiniovy věty dostaneme pro Laplaceovy obrazy $F = \mathcal{L}(f)$, $G = \mathcal{L}(g)$ a $H = \mathcal{L}(h)$ vztah

$$H(z_1, \dots, z_n) = F(z_1, \dots, z_n) G(z_1, \dots, z_n). \quad (4.22)$$

KAPITOLA 4. LAPLACEOVA TRANSFORMACE

Kapitola 5

Laplaceova transformace a odezva

S výbavou ze třetí a čtvrté kapitoly se nyní vrátíme k problému vztahu mezi podnětem odezvou. Ještě předtím si však všimneme dvou možností využití Laplaceovy transformace pro řešení Maxwellových rovnic.

5.1 Úplná Laplaceova transformace Maxwellových rovnic

Předpokládejme, že pro veličiny popisující elektromagnetické pole existují více-rozměrné Laplaceovy obrazy. Označme odpovídající čtveřici komplexních proměnných jako $z_4 = z$, $(z_1, z_2, z_3) = \vec{k}$. Přímým použitím vztahů (4.18) dostaneme Laplaceovu transformaci Maxwellových rovnic ve tvaru

$$-i\vec{k}\vec{\mathcal{D}}(\vec{k}, z) = \tilde{\varrho},$$

$$-i\vec{k}\vec{\mathcal{B}}(\vec{k}, z) = 0,$$

$$-i\vec{k} \times \mathcal{E}(\vec{k}, z) = iz\vec{\mathcal{B}}(\vec{k}, z), \quad (5.1)$$

$$-i\vec{k} \times \vec{\mathcal{H}}(\vec{k}, z) = -iz\vec{\mathcal{D}}(\vec{k}, z) + \vec{\mathcal{J}}(\vec{k}, z) + \vec{\mathcal{J}}_{\text{ext}}(\vec{k}, z).$$

Předpokládejme obecně platnost nelokálního nesynchronního vztahu mezi intenzitou a indukcí elektrického pole. Materiálový vztah mezi proudovou hustotou $\vec{j}(\vec{r}, t)$ a elektrickou intenzitou $\vec{E}(\vec{r}, t)$ je rovněž odezvou typu (2.10) s odezovou funkcí $\sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$, zvanou relativní měrná vodivost. Veličina $\varepsilon_0\sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$ pak představuje měrnou vodivost. Dodefinujeme odezвовé funkce $\alpha(\vec{r}, t)$ a $\sigma(\vec{r}, t)$ nulovou hodnotou vně časoprostorového kužele \mathcal{K} a jejich Laplaceovy obrazy označme $\tilde{\alpha}(\vec{k}, z)$ a $\tilde{\sigma}(\vec{k}, z)$. Dále označme $\tilde{\varepsilon}(\vec{k}, z) = \tilde{\alpha}(\vec{k}, z) + 1$. Pro optické frekvence (tj. 10^{10} s^{-1} až 10^{16} s^{-1}) lze pro relativní magnetickou permeabilitu prostředí použít hodnotu $\mu = 1$.

Užitím teoremu o konvoluci a dosazením transformovaných materiálových vztahů do rovnic (5.1) pak dostaneme řešení Maxwellových rovnic ve tvaru

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, z) = \frac{iz \left(\vec{\mathcal{J}}_{\text{ext}}(\vec{k}, z) + \frac{z^{-1}\vec{k}}{\mu_0\varepsilon_0\tilde{\varepsilon}(\vec{k}, z)} \tilde{\varrho}(\vec{k}, z) \right)}{k^2 - \mu_0\varepsilon_0z^2 \left(\tilde{\varepsilon}(\vec{k}, z) + iz^{-1}\tilde{\sigma}(\vec{k}, z) \right)}, \quad (5.2)$$

$$\vec{\mathcal{H}}(\vec{k}, z) = \frac{i \vec{\mathcal{J}}_{\text{ext}}(\vec{k}, z) \times \vec{k}}{k^2 - \mu_0\varepsilon_0z^2 \left(\tilde{\varepsilon}(\vec{k}, z) + iz^{-1}\tilde{\sigma}(\vec{k}, z) \right)}, \quad (5.3)$$

pro nenulového jmenovatele zlomků. Zvolme $\vec{j}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = 0$ a $\varrho(\vec{r}, t) = 0$. Pak předchozí soustava algebraických rovnic má jednak triviální řešení, jednak může být splněna pro libovolné funkce $\vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, z)$ a $\vec{\mathcal{H}}(\vec{k}, z)$ za předpokladu

$$\begin{aligned} k^2 - \mu_0\varepsilon_0z^2 \left(\tilde{\varepsilon}(\vec{k}, z) + iz^{-1}\tilde{\sigma}(\vec{k}, z) \right) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\alpha}(\vec{k}, z) + \frac{i\tilde{\sigma}(\vec{k}, z)}{z} &= \frac{k^2}{\mu_0\varepsilon_0z^2} - 1. \end{aligned}$$

Levá strana této rovnosti je Laplaceovým obrazem funkce

$$\alpha(\vec{r}, t) + \int_{t_0}^t \sigma(\vec{r}, \tau) d\tau.$$

Laplaceův vzor pravé strany neexistuje vlivem kvadratické závislosti na \vec{k} . Jsou-li tedy proměnné \vec{k} a z nezávislé, mají Maxwellovy rovnice pouze triviální řešení.

5.2 Částečná Laplaceova transformace Maxwellových rovnic

Předpokládejme nyní, že existují jednostranné obrazy funkcí $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{D}(\vec{r}, t)$ a $\alpha(\vec{r}, t)$ vzhledem k proměnné t , s vektorovou proměnnou \vec{r} jako parametrem. Laplaceovy obrazy Maxwellových rovnic pak mají tvar

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{D}}(\vec{r}, z) = \tilde{\varrho}(\vec{r}, z)$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, z) = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, z) = iz \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, z) \quad (5.4)$$

$$\operatorname{rot} \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}, z) = -iz \vec{\mathcal{D}}(\vec{r}, z) + (\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}, z) + \vec{\mathcal{J}}_{\text{ext}}(\vec{r}, z))$$

Uvážíme-li pro jednoduchost nesynchronní materiálové vztahy pro prostředí bez prostorové disperze, dostaneme, opět za předpokladu $\mu = 1$ a $\vec{j}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = 0$ a $\varrho(\vec{r}, t) = 0$,

$$\operatorname{div} (\tilde{\varepsilon}(\vec{r}, z) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, z)) = 0$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}, z) = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, z) = i\mu_0 z \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}, z)$$

$$\operatorname{rot} \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}, z) = -iz\varepsilon_0 \left(\tilde{\varepsilon}(\vec{r}, z) + \frac{i\tilde{\sigma}(\vec{r}, z)}{z} \right) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, z)$$

Funkce $\tilde{n}(\vec{k}, z)$, definovaná vztahem

$$\tilde{n}^2(\vec{r}, z) = \tilde{\varepsilon}(\vec{r}, z) + i \frac{\tilde{\sigma}(\vec{r}, z)}{z}$$

představuje pro reálná z veličinu nazývanou v optice *komplexní index lomu*. Obecně k ní nemusí existovat Laplaceův vzor, ten je zajištěn pouze pro funkci $\tilde{\alpha}(\vec{r}, z) + i\frac{\tilde{\sigma}(\vec{r}, z)}{z}$.

5.3 Jak získat komplexní funkce reálným experimentem?

Vezměme nejprve v úvahu lokální nesynchronní (ale příčinný) vztah (2.5) nebo (2.6) a pro jednoduchost jej zapišme pouze ve tvaru

$$D(t) = \varepsilon_0 E(t) + \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\tau) E(t-\tau) d\tau, \quad P(t) = \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\tau) E(t-\tau) d\tau. \quad (5.5)$$

Tento zjednodušený zápis respektuje všechny podstatné rysy lokálního odezvového vztahu.

Předpokládejme, že funkce $E(t)$, $D(t)$, $\alpha(t)$ jsou prvky \mathcal{K} , tj. existují jejich Laplaceovy obrazy. Označme je $\mathcal{E}(z)$, $\mathcal{D}(z)$ a $\tilde{\alpha}(z)$. Podle vztahu (4.20) pro jednostrannou Laplaceovu transformaci konvoluce platí

$$\mathcal{D}(z) = \varepsilon_0 \mathcal{E}(z) (1 + \tilde{\alpha}(z)). \quad (5.6)$$

Předpokládejme, že odezvová funkce $\alpha(\tau)$ je absolutně integrabilní. Tato vlastnost zajistí splnění požadavku $\alpha \in \mathcal{K}$. (Stačilo by předpokládat dokonce, že je to funkce exponenciálního řádu s indexem růstu 0, tj. omezenost funkce α : $|\alpha| \leq M e^0 t = M$ pro jisté M .) Nechť podnět $E(t)$ má tvar rovinné monochromatické vlny s frekvencí ω , tj.

$$E(t) = E_0 e^{-i\omega t}.$$

Pak pro odezvu platí

$$\begin{aligned} D(t) &= \varepsilon_0 E_0 e^{-i\omega t} + \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha(\tau) E_0 e^{-i\omega(t-\tau)} d\tau = \\ &= \varepsilon_0 E_0 e^{-i\omega t} \left(1 + \int_0^{\infty} \alpha(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \right). \end{aligned}$$

$$D(t) = \varepsilon_0(1 + \tilde{\alpha}(\omega))(E_0 e^{-i\omega t}) = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}(\omega) (E_0 e^{-i\omega t}). \quad (5.7)$$

Uvědomíme-li si, že $D(t)$ je skutečná (měřitelná) odezva na skutečný podnět $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$, vidíme, že funkce $\tilde{\alpha}(\omega)$, daná restrikcí Laplaceova obrazu odezvové funkce α na reálnou osu, resp. funkce

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = 1 + \tilde{\alpha}(\omega),$$

mohou být určeny reálným experimentem.

Funkci $\tilde{\varepsilon}(\omega) = 1 + \tilde{\alpha}(\omega)$ pak přirozeně nazveme *komplexní relativní permitivitou*, funkci $\tilde{\alpha}(\omega)$ *komplexní relativní polarizovatelností*. Uvědomme si, že zatímco funkce $\tilde{\alpha}(z)$ je Laplaceovým obrazem odezvové funkce $\alpha(t) \in \mathcal{K}$, funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$, vzniklá holomorfním rozšířením funkce $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ do komplexní roviny, nemusí mít vzor v \mathcal{K} . (Například pro racionální lomenou funkci $\tilde{\alpha}(z)$, která by vyhovovala větě 4.5, funkce $1 + \tilde{\alpha}(t)$ již této větě nevyhovuje.

V tuto chvíli již lze zodpovědět na první dvě otázky z odstavce 1.3:

- Komplexní dielektrická susceptibilita (relativní polarizovatelnost) $\tilde{\alpha}(\omega)$
- závislá na (reálné) frekvenci

je restrikcí Laplaceova obrazu odezvové funkce $\alpha(\vec{r}, \tau)$ na reálnou osu. Komplexní relativní dielektrická permitivita, komplexní index lomu a komplexní koeficient odrazivosti pro kolmý dopad jsou z ní pak odvozeny takto:

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = 1 + \tilde{\alpha}(\omega), \quad \tilde{\varepsilon}(\omega) = [\tilde{n}(\omega)]^2, \quad \tilde{r}(\omega) = \frac{\tilde{n}(\omega) - 1}{\tilde{n}(\omega) + 1}.$$

Uvažme ještě materiálový vztah respektující vodivost prostředí. Platí (viz odst. 5.1 – ve všech následujících případech jde o restrikci funkcí na reálnou osu)

$$\text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{j},$$

$$\mathcal{L} \left(\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right) = i\omega \mathcal{L}(\vec{D}) = -i\varepsilon_0\omega(1 + \tilde{\alpha}(\omega)) \mathcal{L}(\vec{E}) = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}(\omega) \mathcal{E}(\vec{r}, \omega),$$

$$\mathcal{L}(\vec{j}) = \mathcal{J}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \tilde{\sigma}(\omega) \mathcal{L}(\vec{E}) \Rightarrow \mathcal{J}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \tilde{\sigma}(\omega) \mathcal{E}(\vec{r}, \omega),$$

kde $\tilde{\sigma}(\omega)$ je *komplexní relativní měrná vodivost*, tj. restrikce Laplaceova obrazu odezvové funkce $\sigma(\vec{r}, \tau)$ charakterizující materiálový vztah mezi hustotou proudu a intenzitou elektrického pole (lokální Ohmův zákon). Pak

$$\text{rot } \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 (-i\omega \tilde{\varepsilon}(\omega) + \tilde{\sigma}(\omega)) \mathcal{E}(\vec{r}, \omega).$$

Zavedeme *zobecněnou komplexní permitivitu* a *zobecněnou komplexní vodivost* vztahy

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \tilde{\varepsilon}(\omega) + i \frac{\tilde{\sigma}(\omega)}{\omega}, \quad \tilde{\Sigma}(\omega) = \tilde{\sigma}(\omega) - i\tilde{\varepsilon}(\omega) \Rightarrow \tilde{\varepsilon}(\omega) = i\omega^{-1}\tilde{\Sigma}(\omega).$$

Kapitola 6

Kramersovy–Kronigovy relace

V této kapitole odvodíme integrální vztahy (1.3), (1.4), (1.7) a (1.8) uvedené v první kapitole. Klíčovými jsou vztahy (1.7), které představují Kramersovy–Kronigovy relace mezi reálnou a imaginární částí komplexní polarizovatelnosti $\tilde{\alpha}(\omega)$, která, jak jsme již konstatovali, je restrikcí Laplaceova obrazu odezvové funkce zprostředkující materiálový mezi polarizací a intenzitou elektrického pole na reálnou osu. Z nich bezprostředně vyplývají odpovídající relace pro komplexní dielektrickou permitivitu.

6.1 Kramersovy – Kronigovy relace pro dielektrickou permitivitu

Pro jednoduchost uvažme nejprve případ nevodivého prostředí, tj. $\vec{j} = \vec{0}$. Platí

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}(\omega) = 1 + \tilde{\alpha}(\omega), \quad \tilde{\alpha}(\omega) = \tilde{\alpha}(z)|_{\mathbb{R}}. \quad (6.1)$$

(1) Předpokládali jsme, že odezvová funkce $\alpha(\tau)$ je absolutně integrabilní na intervalu $[0, \infty)$ a zaručili tak konvergenci a holomorfnost jejího jednostranného Laplaceova obrazu v horní polorovině \mathbb{C}_h komplexní roviny. Zavedme další předpoklady na funkci $\alpha(\tau)$, které budou z fyzikálního hlediska celkem přirozené:

(2) Absolutní integrabilita derivace funkce $\alpha(\tau)$ na intervalu $[0, \infty)$, která zajišťuje v horní polorovině holomorfnost Laplaceova obrazu

$$\mathcal{L}\left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) = -iz \mathcal{L}(\alpha) = -iz\tilde{\alpha}(z). \quad (6.2)$$

Tento předpoklad dále zaručí chod funkce $\tilde{\alpha}(z)$ pro $z \rightarrow \infty$ k nule úměrně alespoň z^{-1} , tj.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z \tilde{\alpha}(z) = 0. \quad (6.3)$$

Skutečně, položme

$$z = R e^{i\varphi}, \quad \varphi \in [0, \pi], \quad R \rightarrow \infty.$$

Pak

$$\left| z \int_0^{\infty} \alpha(\tau) e^{iz\tau} d\tau \right| \leq \int_0^{\infty} R |\alpha(\tau)| e^{-R\tau \sin \varphi} d\tau \rightarrow 0$$

pro $R \rightarrow \infty$, neboť $\sin \varphi > 0$ pro $\varphi \in (0, \pi)$. Dále definujeme funkci

$$\mathcal{F}(z) = \frac{\tilde{\varepsilon}(z) - 1}{z - \omega} = \frac{\tilde{\alpha}(z)}{z - \omega}, \quad \omega \in \mathbf{R}. \quad (6.4)$$

Vlastnosti této funkce představují *postačující* podmínky pro následující důkaz Kramersových – Kronigových vztahů mezi reálnou a imaginární částí komplexní relativní permitivity:

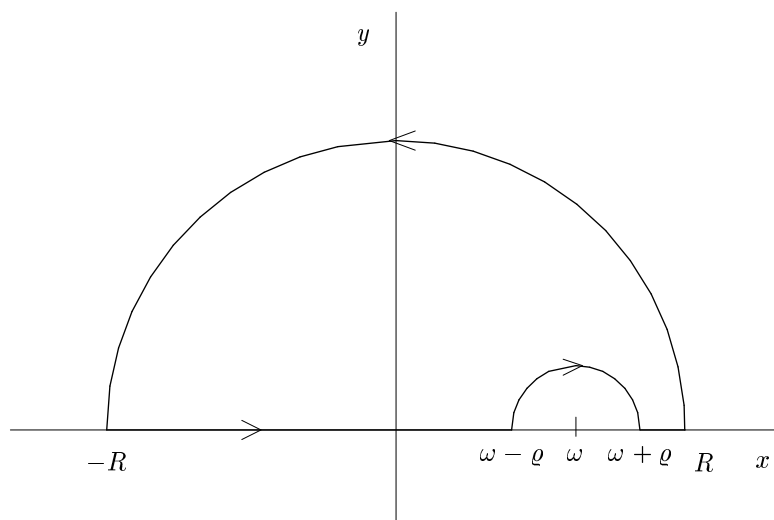
- Je holomorfní v \mathbf{C}_h s výjimkou jednoduchého pólu $z = \omega$ na reálné ose.
- Pro $z \rightarrow \infty$ jde k nule úměrně alespoň $|z|^{-2}$.

Zvolme integrační křivku \mathcal{C} v \mathbf{C}_h podle obrázku 5.1, složenou ze dvou úseček

$$\mathcal{U}_1 : z(x) = x, \quad x \in (-\infty, \omega - \varrho], \quad \mathcal{U}_2 : z(x) = x, \quad x \in [\omega + \varrho, \infty)$$

a dvou půlkružnic

$$\mathcal{K}_\varrho : z = \omega + \varrho e^{it}, \quad t \in [\pi, 0], \quad \mathcal{K}_R : z = R e^{it}, \quad t \in [0, \pi].$$



Obr. 6.1 Integrační křivka pro Kramersovy-Kronigovy relace

Podle Cauchyovy věty je

$$\int_C \mathcal{F}(z) dz = 0$$

pro libovolně zvolené poloměry $0 < \rho < R - |\omega|$. Odtud

$$\int_{-R}^{\omega-\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}(x) - 1}{x - \omega} dx + \int_{\omega+\rho}^R \frac{\tilde{\varepsilon}(x) - 1}{x - \omega} dx +$$

$$+ i\rho \int_{\pi}^0 \frac{\tilde{\varepsilon}(\omega + \rho e^{it}) - 1}{\rho e^{it}} e^{it} dt + iR \int_0^{\pi} \frac{\tilde{\varepsilon}(R e^{it}) - 1}{R e^{it} - \omega} e^{it} dt = 0$$

Všechny integrály existují i v limitě pro $\rho \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$. První dva integrály v této limitě dávají integrál v mezích $(-\infty, \infty)$ ve smyslu hlavní hodnoty, poslední integrál je roven nule díky poklesu integrandu alespoň s druhou mocninou R , integrál po půlkružnici \mathcal{K}_ρ je v limitě pro $\rho \rightarrow 0$ roven $-i\pi (\tilde{\varepsilon}(\omega) - 1)$. Rozdělením na reálnou a imaginární část dostáváme výsledné vztahy

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_2(x)}{x - \omega} dx, \quad \varepsilon_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_1(x) - 1}{x - \omega} dx. \quad (6.5)$$

Další vlastnosti funkce $\tilde{\alpha}(z) = \tilde{\varepsilon}(z) - 1$:

(1) Odezvová funkce $\alpha(\tau)$ je reálná. Odtud

$$\tilde{\alpha}^*(z) = \int_0^{\infty} \alpha(\tau) e^{-iz^*\tau} dt = \tilde{\alpha}(-z^*).$$

Pro $z = \omega \in \mathbf{R}$ je

$$\tilde{\alpha}^*(\omega) = \tilde{\alpha}(-\omega) \Rightarrow \alpha_1(\omega) = \alpha_1(-\omega), \quad \alpha_2(\omega) = -\alpha_2(-\omega). \quad (6.6)$$

Reálná část komplexní polarizovatelnosti je tedy sudou funkcí proměnné ω , zatímco imaginární část je funkcí lichou. Integrály (6.5) představující Kramersovy – Kronigovy relace lze tedy přepsat takto:

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{x \varepsilon_2(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad \varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(x) - 1}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (6.7)$$

(2) Chování funkce $\tilde{\alpha}(z)$ na imaginární ose:

$$\tilde{\alpha}^*(iy) = \tilde{\alpha}(iy) \Rightarrow \alpha_2(iy) = 0.$$

Pro případ vodivého prostředí jsou úvahy vedoucí k odpovídajícím Kramersovým – Kronigovým relacím obdobné, pracuje se s funkcí

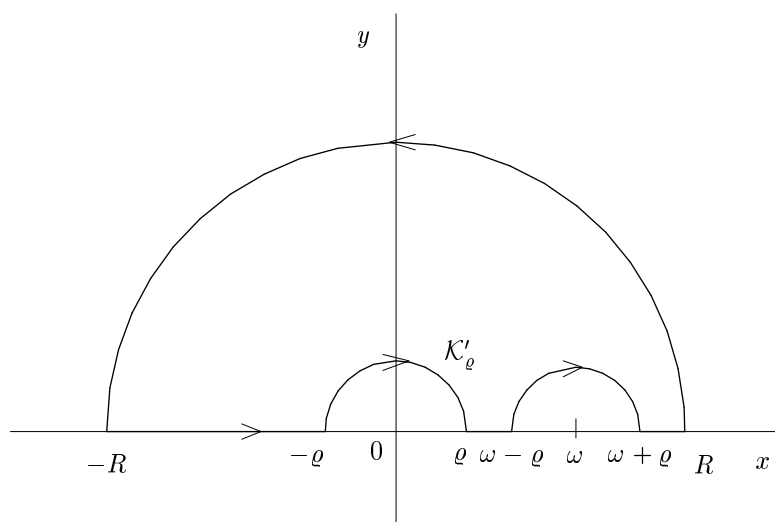
$$\Phi(z) = \frac{\tilde{\varepsilon}(z) - 1}{z - \omega}, \quad \tilde{\varepsilon}(z) = \tilde{\varepsilon}(z) + iz^{-1} \tilde{\sigma}(z).$$

Předpokládáme-li absolutní integrabilitu odezvové funkce $\sigma(\tau)$ a její derivace na intervalu $[0, \infty)$, můžeme ukázat chod integrálu

$$\frac{i}{z} \int_0^{\infty} \sigma(\tau) e^{iz\tau} d\tau$$

k nule úměrně alespoň $|z|^{-2}$. Na funkci $\Phi(z)$ pak aplikujeme opět Cauchyovu větu. Použijeme však křivku, která se od křivky \mathcal{C} , pro nevodivé prostředí liší tím, že navíc „obchází“ singulární bod 0 po půlkružnici

$$\mathcal{K}'_{\varrho} : z = \varrho e^{it}, t \in [\pi, 0].$$



Obr. 6.2 Integrační křivka pro Kramersovy-Kronigovy relace

Je tedy třeba ještě vypočítat integrál

$$\lim_{\varrho \rightarrow 0} \int_{\mathcal{K}'_{\varrho}} \Phi(z) dz.$$

Platí

$$\Phi(z) = \frac{\tilde{\varepsilon}(z)}{z - \omega} + \frac{i\tilde{\sigma}(z)}{z(z - \omega)} = \frac{1}{z} \frac{z\tilde{\varepsilon}(z) + i\tilde{\sigma}(z)}{z - \omega} = \frac{1}{z} h(z).$$

Funkce $h(z)$ je holomorfní v jistém okolí bodu $z = 0$ a lze ji proto rozvinout ve (stejněměrně a absolutně konvergentní) Taylorovu řadu. Pak

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{K}'_\varrho} \Phi(z) dz &= \left(\int_{\mathcal{K}'_\varrho} b_0 z^{-1} dz + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathcal{K}'_\varrho} b_n z^{n-1} dz \right) = \\ &= \int_{\pi}^0 \frac{b_0}{\varrho e^{it}} i \varrho e^{it} dt + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\pi}^0 b_n \varrho^{n-1} e^{i(n-1)t} i e^{it} dt = -i\pi b_0 + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \varrho^n \left[\frac{e^{int}}{in} \right]_{\pi}^0. \end{aligned}$$

Výrazy za sumou jsou v limitě $\varrho \rightarrow 0$ nulové, a proto

$$\int_{\mathcal{K}'_\varrho} \Phi(z) dz = -i\pi b_0 = i\pi h(0) = \frac{\pi \tilde{\sigma}(0)}{\omega}.$$

Odpovídající Kramersovy–Kronigovy relace mají tvar

$$\epsilon_1(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_2(x)}{x - \omega} dx, \quad \epsilon_2(\omega) = \frac{\tilde{\sigma}(0)}{\omega} - \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_1(x) - 1}{x - \omega} dx. \quad (6.8)$$

(Hodnota $\tilde{\sigma}(0)$ je reálná (statická relativní vodivost)).

6.2 Kramersovy–Kronigovy relace pro derivace

Pro potřebu vyhodnocení experimentů modulační spektroskopie si všimněme ještě Kramersových – Kronigových relací pro derivace reálné a imaginární části restrikce Laplaceova obrazu odezvové funkce $\tilde{\alpha}(z) = \tilde{\epsilon}(z) - 1$. Ukážeme, že platí disperzní relace ve tvaru

$$\frac{\partial \epsilon_1(\omega)}{\partial \omega} = \frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\partial \epsilon_2(x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{x^2 - \omega^2} \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial \epsilon_2(\omega)}{\partial \omega} = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\partial \epsilon_1(x)}{\partial x} \cdot \frac{x dx}{x^2 - \omega^2}$$

Pro holomorfní funkci $F(z) = u(x, y) + i v(x, y)$ platí (viz odst. 3.1)

$$F'(z) = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + i \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial y(x, y)}{\partial y} - i \frac{\partial u(x, y)}{\partial y}.$$

Využitím první části tohoto vztahu pro funkci $\tilde{\alpha}(z) = \tilde{\varepsilon}(z) - 1$ a při označení $\omega = \operatorname{Re} z$ dostáváme (pro libovolné $z = \omega + iy$)

$$\tilde{\alpha}'(z) = \frac{\partial \varepsilon_1(\omega)}{\partial \omega} + i \frac{\partial \varepsilon_2(\omega)}{\partial \omega}$$

Z holomorfnosti funkce $\tilde{\alpha}(z)$, zaručené požadavkem její absolutní integrability, vyplývá jednak holomorfnost její derivace $\tilde{\alpha}'(z)$, jednak platnost vztahu analogického (6.3), tj.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z \tilde{\alpha}'(z) = 0.$$

Při restrikci na reálnou osu ($\operatorname{Im} z = y = 0$) tedy budou pro funkce $\partial \varepsilon_1(\omega)/\partial \omega$ a $\partial \varepsilon_2(\omega)/\partial \omega$ platit Kramersovy – Kronigovy vztahy analogické (6.5). Vezmeme-li v úvahu vlastnosti funkce $\tilde{\alpha}'(z)$ vyplývající z (6.6)

$$\alpha'_1(\omega) = -\alpha'_1(-\omega), \quad \alpha'_2(\omega) = \alpha'_2(-\omega),$$

kde $\alpha'_1(\omega)$ a $\alpha'_2(\omega)$ jsou derivace reálné a imaginární části odezvvé funkce $\tilde{\alpha}(z)$ po restrikci na reálnou osu, dostáváme nakonec

$$\frac{\partial \varepsilon_1(\omega)}{\partial \omega} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \varepsilon_2(x)/\partial x}{x - \omega} dx = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\partial \varepsilon_2(x)/\partial x}{x^2 - \omega^2} dx, \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_2(\omega)}{\partial \omega} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \varepsilon_1(x)/\partial x}{x - \omega} dx = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \partial \varepsilon_1(x)/\partial x}{x^2 - \omega^2} dx.$$

6.3 Kramersovy–Kronigovy relace pro koeficient odrazivosti

Koeficient odrazivosti je dán vztahem (1.5)

$$\tilde{r}(\omega) = \varrho(\omega) e^{i\theta(\omega)} = -\frac{\tilde{n}(\omega) - 1}{\tilde{n}(\omega) + 1} = -\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega) - 1}}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(\omega) + 1}} = -\frac{\sqrt{1 + \tilde{\alpha}(\omega)} - 1}{\sqrt{1 + \tilde{\alpha}(\omega)} + 1}$$

a stejně jako komplexní index lomu je komplexní funkcí reálné proměnné ω definovanou pomocí restrikce odezvvé funkce $\tilde{\alpha}$ na reálnou osu. (Pro případ

kovů bychom nahradili $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ funkcí $\tilde{\varepsilon}(\omega)$.) Zabývejme se otázkou, zda pro modul a argument koeficientu odrazivosti platí Kramersovy – Kronigovy relace ve tvaru (1.4), běžně používaném při zpracování experimentálních dat při studiu optických vlastností pevných látek. Připomeňme, že pro funkci $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ resp. $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ jsme odpovídající relace (6.5) resp. (6.8) odvodili integrací funkce $\mathcal{F}(z)$ definované vztahem (6.4) po křivce na obr. 6.1 resp. 6.2 za předpokladu, že \mathcal{F} splňovala jednoduché *postačující*(!) podmínky: holomorfnost v \mathbf{C}_h s výjimkou bodu $x = \omega > 0$ (popřípadě i bodu $x = 0$) a dostatečně rychlý pokles pro $|z| \rightarrow \infty$ (úměrně alespoň $|z|^{-2}$). Pro každou funkci, která bude tyto podmínky splňovat, budou Kramersovy – Kronigovy relace platit a jejich důkaz může být veden stejným způsobem jako pro funkci $\tilde{\varepsilon}(\omega)$. Tyto podmínky nyní prověříme pro koeficient odrazivosti $\tilde{r}(\omega)$. Rozšířením do komplexní roviny, tj. záměnou $\omega \rightarrow z$, dostáváme funkci

$$\tilde{r}(z) = -\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} + 1} = -\frac{\sqrt{1 + \tilde{\alpha}(z)} - 1}{\sqrt{1 + \tilde{\alpha}(z)} + 1}.$$

Vzhledem k vlastnostem funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ (viz text za vztahem (6.4))

- holomorfnost v horní polorovině (eventuelně u $\tilde{\varepsilon}(z)$ s výjimkou pólu $z = 0$ pro kovy),
- pokles $\tilde{\varepsilon}(z) - 1$ k nulové hodnotě přinejmenším úměrně R^{-1} pro $z = R e^{i\varphi}$, $R \rightarrow \infty$,
- platnost vztahu $\tilde{\varepsilon}(-z^*) = \tilde{\varepsilon}^*(z)$,

má funkce $\tilde{r}(z)$ následující vlastnosti (úvahy pro kovy jsou zcela obdobné, $\tilde{\varepsilon}(z)$ se nahradí $\tilde{\varepsilon}(z)$):

1. Je holomorfní v horní polorovině, pokud v ní neleží nulové body komplexní relativní permitivity $\tilde{\varepsilon}(z)$, tj.

$$\tilde{\varepsilon}(z) = 0 \quad (\text{body větvení odmocniny}).$$

2. Platí pro ni $\tilde{r}^*(z) = \tilde{r}(-z^*)$. Skutečně,

$$\tilde{r}(-z^*) = -\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(-z^*)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(-z^*)} + 1} = -\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}^*(z)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}^*(z)} + 1} = \tilde{r}^*(z).$$

3. Pro $z = R e^{i\varphi}$ a $R \rightarrow \infty$ platí

$$\begin{aligned} \tilde{r}(z) &= -\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(R e^{i\varphi})} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(R e^{i\varphi})} + 1} = -\frac{\sqrt{\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi}) + 1} - 1}{\sqrt{\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi}) + 1} + 1} \sim \\ &\sim \frac{\sqrt{KR^{-1} + 1} - 1}{\sqrt{KR^{-1} + 1} + 1} = \frac{\sqrt{K + R} - \sqrt{R}}{\sqrt{K + R} + \sqrt{R}} = \frac{K}{R} \frac{1}{\left(\sqrt{1 + \frac{K}{R}} + 1\right)^2} \sim \frac{1}{R}, \end{aligned}$$

$$\frac{\tilde{r}(z)}{z - x} \sim \frac{1}{R^2} \Rightarrow \int_{\kappa} \frac{r(z)}{z - x} dz \sim \frac{1}{R}.$$

Možnost dokázat platnost Kramersových – Kronigových relací pro koeficient odrazivosti stejným způsobem jako pro $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ mohou tedy narušit nulové body komplexní relativní permitivity, které představují body větvení odmocniny $\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)}$. K tomuto problému se ještě vrátíme v kap. 8.

Pokud je tedy funkce $\tilde{\varepsilon}(z) - 1$ Laplaceovým obrazem odezvové funkce $\alpha(t)$ ze vztahů (5.5) a $\tilde{\varepsilon}(z)$ navíc nemá v \mathbf{C}_h nulové body, platí Kramersovy – Kronigovy relace také pro reálnou a imaginární část koeficientu odrazivosti. Svazují tedy funkce

$$\operatorname{Re} \tilde{r}(\omega) = \varrho(\omega) \cos \theta(\omega) \quad \text{a} \quad \operatorname{Im} \tilde{r}(\omega) = \varrho(\omega) \sin \theta(\omega).$$

Tyto vztahy nejsou, bohužel, pro zpracování optických spekter vhodné. Experimentálně přímo dostupnou veličinou je totiž odrazivost $R(\omega) = \sqrt{\varrho(\omega)}$. Je tedy třeba získat odpovídající integrální relace mezi modulem $\varrho(\omega)$ a fází $\theta(\omega)$ koeficientu odrazivosti. Definujme funkci

$$\tilde{h}(z) = \ln \tilde{r}(z) = \ln \left(-\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} - 1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} + 1} \right) = \ln \varrho(z) + i\theta(z).$$

Vidíme, že funkce

$$\mathcal{F}(z) = \frac{\tilde{h}(z)}{z - x}$$

poruší vlastnosti požadované při jednoduchém důkazu Kramersových – Kronigových relací pro $\tilde{\varepsilon}(z) = 1$ (body větvení logaritmu). Kromě toho se pro

$z = R \exp(i\varphi)$, $R \rightarrow \infty$, chová úměrně ($R^{-1} \ln R$) a nevyhovuje tedy požadavku dostatečně rychlého poklesu k nule pro $R \rightarrow \infty$. Nelze proto zajistit vymizení jejího integrálu po půlkružnici s poloměrem $R \rightarrow \infty$ na obr. 6.1 resp. 6.2.

Zdá se, že jsme narazili na problém. Vzhledem k tomu, že jsme zatím prověřovali jen jisté postačující, a tedy možná zbytečně silné, podmínky pro platnost Kramersových – Kronigových relací, nemusí být věc ještě ztracena. Obecnější problém je však poměrně složitý, a tak se k němu vrátíme až v kap. 8. Prozatím připustíme, že Kramersovy – Kronigovy relace pro $\varrho(\omega)$ a $\theta(\omega)$ platí a od jejich tvaru

$$\ln \varrho(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(x)}{x - \omega} dx \quad \theta(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln \varrho(x)}{x - \omega} dx$$

přejdeme k vyjádření integrálů v mezích 0 až ∞ . Tato možnost je zaručena vlastností $\tilde{h}(-z^*) = \tilde{h}^*(z)$.

$$\ln \varrho(\omega) = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\theta(x)}{x^2 - \omega^2} dx \quad \theta(\omega) = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln \varrho(x)}{x^2 - \omega^2} dx$$

Všimněme si nyní problému hlavní hodnoty. Přičteme k $\theta(\omega)$ integrál

$$\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln \varrho(\omega)}{x^2 - \omega^2} dx = \frac{2\omega \ln \varrho(\omega)}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\delta}^{\infty} \frac{dx}{x^2 - \omega^2} =$$

$$\frac{2\omega \ln \varrho(\omega)}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2\omega} \left[\ln \left| \frac{x - \omega}{x + \omega} \right| \right]_{\delta}^{\infty} = 0.$$

Dostáváme

$$\theta(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln(\varrho(x)/\varrho(\omega))}{x^2 - \omega^2} dx \quad (6.11)$$

Integrand má v bodě $z = \omega$ nejvýše odstranitelnou singularitu, neboť existuje konečná limita

$$\lim_{z \rightarrow \omega} \frac{\ln(\varrho(x)/\varrho(\omega))}{x^2 - \omega^2} = \omega^{-1} \frac{\varrho'(\omega)}{2\varrho(\omega)}$$

Vyjdeme-li tedy při výpočtu fáze ze vztahu (6.11), výpočtu hlavní hodnoty integrálu se vyhneme.

6.4 Kramersovy–Kronigovy relace pro index lomu

Pro reálnou a imaginární část komplexního indexu lomu $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ se běžně používají Kramersovy – Kronigovy relace ve tvaru (1.8), tj.

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{x k(x)}{x^2 - \omega^2} dx, \quad k(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{n(x)}{x^2 - \omega^2} dx. \quad (6.12)$$

Za předpokladu, že pro $n_1(\omega) - 1$ a $n_2(\omega)$ platí vztahy (6.5) stejně jako pro funkce $\varepsilon_1(\omega) - 1$ a $\varepsilon_2(\omega)$, získáme (1.8) jednoduše, neboť funkce

$$\tilde{n}(z) - 1 = \sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} - 1 = \sqrt{\tilde{\alpha}(z) + 1} - 1$$

vyhovuje stejné vlastnosti symetrie jako $\tilde{\alpha}(z)$, platí tedy pro ni (6.6). Abychom rozhodli o možnosti dokázat (6.5) pro funkci $\tilde{n}(z) - 1$ stejným postupem jako pro $\tilde{\varepsilon}(z)$, musíme se zabývat stejnými otázkami jako v odst. 6.3: Jsou splněny *postačující* podmínky pro funkci

$$F(z) = \frac{\tilde{n}(z) - 1}{z - \omega} ?$$

Odděleně je třeba řešit problém nulových bodů funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ (bodů větvení její odmocniny), vždy pro konkrétní mikroskopický fyzikální model, umožňující získat funkci $\tilde{\varepsilon}(z)$. Jedním z fyzikálních systémů, o němž je experimentálně zjištěno, že reálná i imaginární část funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ mohou nabývat nulové hodnoty současně a dávat tak vznik bodu větvení odmocniny z této funkce, jsou volné elektrony v kovu. Otázce se budeme podrobněji věnovat v kap. 8. Pro tuto chvíli uvažujme o takovém fyzikálním systému, pro který funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ v \mathbf{C}_h nulové body nemá. Zbývá tedy prověřit pouze chování funkce $\mathcal{F}(z)$ pro $z = R \exp(i\varphi)$, $R \rightarrow \infty$. Platí

$$\lim_{R \rightarrow \infty} |z [\tilde{n}(z) - 1]| = \lim_{R \rightarrow \infty} R |\sqrt{\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi}) + 1} - 1| =$$

$$= \lim_{R \rightarrow \infty} R \frac{|\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi})|}{|\sqrt{\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi}) + 1} + 1|}.$$

Vzhledem k vlastnostem funkce $\tilde{\alpha}(z)$ je

$$\lim_{R \rightarrow \infty} R |\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi})| = 0, \quad \text{a funkce}$$

$$\frac{1}{|\sqrt{\tilde{\alpha}(R e^{i\varphi}) + 1} + 1|} \sim \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{R} + 1} + 1}$$

je pro $R \rightarrow \infty$ omezená. Proto platí

$$\lim_{R \rightarrow \infty} |z [\tilde{n}(z) - 1]| = 0 \quad \text{pro } z = R e^{i\varphi}.$$

Vidíme, že pokud funkce $\tilde{\alpha}(z) = \tilde{\varepsilon}(z) - 1$ splňuje postačující podmínky, na základě nichž jsme provedli důkaz Kramersových – Kronigových relací pro její reálnou a imaginární část, a pokud současně funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ nemá v horní polovině komplexní roviny nulové body, splňuje funkce $\tilde{n}(z) - 1$ tytéž podmínky a platí pro ni tedy Kramersovy – Kronigovy relace ve formálně stejném tvaru, tj. (1.8).

6.5 Extrapolace experimentálních dat

Při použití Kramersových–Kronigových relací pro zpracování experimentu se objevuje problém extrapolace experimentálních dat: Předpokládejme, že měřenou veličinou je odrazivost $R(x)$ v určitém spektrálním rozsahu. V tomto rozsahu tedy máme k dispozici modul koeficientu odrazivosti $\varrho(x) = \sqrt{R(x)}$. Pro fázi koeficientu odrazivosti platí vztah (6.11), viz též (1.4). Aby bylo možno fázi vypočítat přesně, je nutno znát $\varrho(x)$ v intervalu proměnné $x \in [0, \infty)$. Experiment poskytuje pouze interval $[\omega_1, \omega_2]$, určený spektrálním rozsahem měření. Jednou z možností, jak získat $\varrho(x)$ v širším rozsahu, je extrapolace experimentálních dat. Následující ukázka obsahuje příklad vyhodnocení experimentálních dat získaných měřením odrazivosti germania modulované střídavým jednoosým pnutím v rozsahu energií $\hbar x = E$ v intervalu $1,8 \text{ eV}$ až $4,1 \text{ eV}$.

Pro extrapolaci k nižším frekvencím bylo použito logaritmické derivace křivky experimentálně zjištěné odrazivosti, pro extrapolaci k frekvencím vyšším jednak experimentálně zjištěné odrazivosti modulované střídavou změnou teploty (termoreflexní spektrum), jednak opět logaritmické derivace odrazivosti. Srovnání obou typů extrapolace při vyhodnocení složek piezooptického tenzoru germania ve sledované oblasti energií od $1,8 \text{ eV}$ až $4,1 \text{ eV}$ je na následujících obrázcích.

Obr. 6.3-a Extrapolace experimentálních dat

Obr. 6.3-b Extrapolace experimentálních dat

Velmi vtipná možnost, jak zjistit průběh funkcí $\varrho(x)$ a $\theta(x)$ se nabízí, jsou-li k dispozici závislosti $\varrho(x)$ resp. $\theta(x)$ v intervalech $[\omega_1, \omega_2]$, resp. $[\omega'_1, \omega'_2]$ s neprázdným průnikem ([7]). Fyzikální podklad pro tento předpoklad je následující: Měření odrazivosti dává $\varrho(x)$ například v poměrně širokém intervalu $[0, \omega_0]$. V úzkém intervalu $[0, \omega_g]$, kde ω_g odpovídá absorpční hraně vzorku, je k dispozici informace o fázi: $\theta(x) = 0$.

Vzniká otázka, zda tyto informace opravdu postačí k rekonstrukci spekter $\varrho(\omega)$ a $\theta(\omega)$ v širším frekvenčním rozsahu. Odpověď je díky platnosti věty o jednoznačnosti kladná za předpokladu, že údaje $\varrho(x)$ a $\theta(x)$ na intervalu $[\omega_1, \omega_2]$ jsou z hlediska Kramersových – Kronigových vztahů kompatibilní (neporušují je). Označme $\Psi(x) = \ln \varrho(x)$. Pak

$$\theta(\omega) = -\frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{x^2 - \omega^2} \Psi(x) dx \quad (6.13)$$

Dále označme

$$\Psi(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x) \quad \theta(x) = \theta_1(x) + \theta_2(x)$$

kde $\Psi_1(x) = \Psi(x)$ na intervalu $[0, \omega_0]$, $\theta_1(x)$ je odpovídající příspěvek k integrálu (6.12). Vzhledem k tomu, že fáze $\theta(x)$ je známa v intervalu $[0, \omega_g]$ (je na něm nulová), lze na tomto intervalu určit $\theta_2(x)$ a rozvinout v řadu

$$\theta_2(x) = \theta(x) - \theta_1(x) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \omega^{2n+1} \int_0^{\infty} x^{-2(n+1)} \Psi_2(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \omega^{2n+1}$$

Koeficienty řady lze v principu použít pro konstrukci holomorfního rozšíření funkce $r(x) = \varrho(x) \exp i\theta(x)$ z intervalu $[0, \omega_g]$ (každý bod libovolného intervalu v \mathbf{R} je hromadným bodem tohoto intervalu v \mathbf{C}) do komplexní roviny. Restrikcí na reálnou osu dostaneme $\varrho(x)$ a $\theta(x)$ v celém spektrálním rozsahu.

Kapitola 7

Fyzikální aplikace

V této kapitole ukážeme, jak se vlastnosti funkcí komplexní proměnné, Laplaceova transformace nebo Kramersovy – Kronigovy relace uplatní při studiu konkrétních fyzikálních systémů. Na základě mikroskopického fyzikálního modelu a platnosti vztahu (5.3), umožňujícího výpočtem odezvy na podnět tvaru monochromatické vlny $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$ získat přímo restrikcí Laplaceova obrazu odezvové funkce na reálnou osu, určíme v jednotlivých případech funkci $\tilde{\alpha}(\omega)$. Prověříme pak její vlastnosti z hlediska platnosti Kramersových – Kronigových relací. Kapitola bude vhodnými fyzikálními příklady průběžně doplňována.

7.1 Klasický mikroskopický model

Pomocí klasického mikroskopického modelu vypočteme dipólový moment objemové jednotky optického prostředí, komplexní relativní permitivitu a odpovídající odezvoovou funkci $\alpha(t)$.

Uvažme jednoduchý klasický model mechanického oscilátoru s tlumením pohybujícího se pod vlivem periodicky proměnné vynucující síly. Vypočteme dipólový moment \vec{P} objemové jednotky prostředí obsahující N takových oscilátorů, z nichž každý má náboj e .

$$m\ddot{\vec{x}} + m\Gamma\dot{\vec{x}} + m\omega_0^2\vec{x} = e\vec{E}_0 e^{-i\omega t}$$

Řešením této jednoduché rovnice získáme časovou závislost $\vec{x}(t)$ nutnou pro výpočet $\vec{P}(t)$.

$$\vec{P}(t) = eN\vec{x} = -\frac{e^2 N \vec{E}_0 e^{-i\omega t}}{m[(\omega^2 - \omega_0^2) + i\Gamma\omega]}. \quad (7.1)$$

(Pro výpočet $\vec{P}(t)$ bylo ve vztahu (7.1) použito partikulární řešení pohybové rovnice představující netlumené kmity s vynucující frekvencí ω , které v podstatné míře určuje charakter závislosti $x(t)$ poté, co dojde k útlumu vlastních kmitů.) Současně je podle (5.7)

$$\vec{P}(t) = \varepsilon_0 \tilde{\alpha}(\omega) \vec{E}_0 e^{-i\omega t}.$$

Porovnáním se vztahem (7.1) dostáváme

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(\omega) &= \frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m} (\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)^{-1} \\ \varepsilon_1(\omega) - 1 &= \frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \\ \varepsilon_2(\omega) &= \frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m} \frac{\Gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \end{aligned}$$

Funkce $\varepsilon_1(\omega)$ a $\varepsilon_2(\omega)$ splňují Kramersovy – Kronigovy relace, neboť vyhovují vlastnostem funkce \mathcal{F} definované vztahem (6.4) (viz shrnutí vlastností bezprostředně za (6.4)). Užitím Bromwichova – Melinova vzorce vypočteme vzor $\alpha(t)$ k Laplaceovu obrazu $\tilde{\alpha}(z) = \tilde{\varepsilon}(z) - 1$.

$$\alpha(t) = \frac{1}{2\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \tilde{\alpha}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

Užijeme věty o reziduích. Integrovaná funkce má tyto vlastnosti:

$$\tilde{\alpha}(z) e^{-izt} = \tilde{\alpha}(\omega) e^{-i\omega t} e^{yt}$$

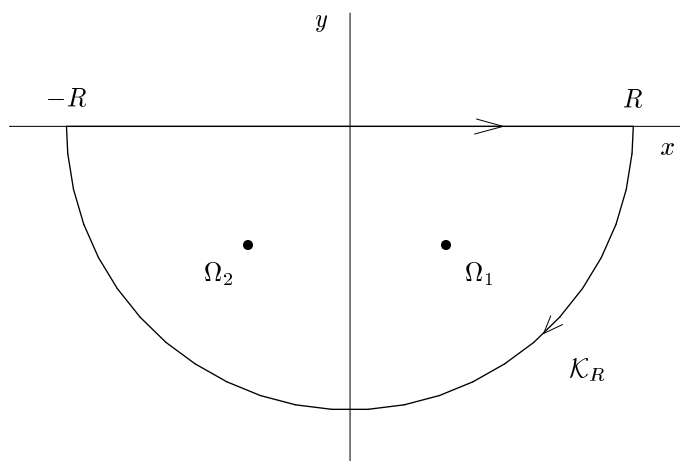
Pro $z \rightarrow \infty$ jde k nule rychleji než R^{-2} , je-li z v dolní polorovině komplexní roviny ($y = \text{Im } z < 0$). V dolní polovině je meromorfní, má v ní dva jednoduché póly

$$\Omega_{1,2} = -\frac{i\Gamma}{2} \pm \left(\omega_0^2 - \frac{\Gamma^2}{4} \right)^{1/2} \quad \text{za předpokladu} \quad \omega_0 > \frac{\Gamma}{2}.$$

Hodnoty reziduí v těchto pólech jsou

$$\text{rez}_{1,2} = \text{rez} \left(\tilde{\alpha}(z) e^{-izt} \right)_{\Omega_{1,2}} = \pm \frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m} \frac{e^{-i\Omega_{1,2}t}}{\Omega_2 - \Omega_1}.$$

Zvolme integrační křivku \mathcal{C} složenou z přímkového úseku $[-R, R]$ a půlkružnice \mathcal{K}_R se středem v počátku a poloměrem R , ležící v dolní polorovině (viz obr. 7.1).



Obr. 7.1 Klasický mikroskopický model

Při dostatečně velkém R tato půlkružnice obepíná oba póly. Platí

$$\int_{-R}^R \tilde{\alpha}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega + \int_{\mathcal{K}_R} \tilde{\alpha}(z) e^{-izt} dz = 2\pi i(\text{rez}_1 + \text{rez}_2).$$

V limitě $R \rightarrow \infty$ je integrál po půlkružnici \mathcal{K}_R nulový. Pro odezvousou funkci $\alpha(t)$ tak dostaneme

$$\alpha(t) = -\frac{e^2 N}{\varepsilon_0 m} \frac{\sin t \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\Gamma^2}{4}}}{\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\Gamma^2}{4}}} e^{-\frac{\Gamma t}{2}}.$$

7.2 Plazmony

Uvažujme o systému volných elektronů s objemovou koncentrací N_0 v elektrickém poli o intenzitě \vec{E} . Nejjednodušším modelem pohybu tohoto systému jsou jednorozměrné netlumené kmity: Označme $\xi(x, t)$ výchylku elementu z jeho rovnovážné polohy x vlivem pole. Náboj, rozložený v rovnovážném stavu ve vrstvě dx je úměrný veličině $N_0 dx$. Vlivem pole se rozloží do vrstvy $(x + d\xi)$, odpovídající koncentrace volných elektronů pak bude N . Platí

$$N_0 dx = N(dx + d\xi) \Rightarrow N \doteq N_0 \left(1 - \frac{d\xi}{dx}\right).$$

V rovnovážném (neutrálním) stavu je hustota celkového náboje nulová. Předpokládejme, že v přítomnosti pole se nezmění hustota kladných nábojů (ionty vzniklé oddělením volných elektronů). Vlivem posuvu volných elektronů vznikne nenulová hustota náboje

$$\varrho = e(N - N_0) = -eN_0 \frac{d\xi}{dx}.$$

Uvažujeme-li případ vakua, platí (první Maxwellova rovnice)

$$\varepsilon_0 \text{div } \vec{E} = \varrho \Rightarrow \frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{eN_0}{\varepsilon_0} \frac{d\xi}{dx} \Rightarrow E = -\frac{eN_0}{\varepsilon_0} \xi,$$

při podmínce $\xi(E = 0) = 0$.

Pohybová rovnice elementu náboje má tedy tvar

$$m\ddot{\xi} + \frac{e^2 N_0}{\varepsilon_0} \xi = 0.$$

Jejím řešením jsou netlumené kmity s frekvencí

$$\omega_p = \left(\frac{e^2 N_0}{\varepsilon_0 m} \right)^{1/2}$$

zvanou *plazmová frekvence*. Podmínka pro vznik podélných netlumených kmitů vyplývá z Maxwellových rovnic. Požadavek podélnosti kmitů vede ke vztahu (viz [8])

$$\vec{k} \times \vec{E} = \vec{0} \Rightarrow \vec{H} = \vec{0} \Rightarrow \frac{i\omega}{c} \tilde{\varepsilon}_\ell \vec{E} = 0 \Rightarrow \tilde{\varepsilon}_\ell = 0.$$

Nejjednodušším mikroskopickým modelem plazmových kmitů je model Drudeho, popisující systém elektronů v poli $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp -i\omega t$ pohybovou rovnicí

$$m\dot{\vec{v}} + m\Gamma\vec{v} = e\vec{E}_0 e^{-i\omega t} \Rightarrow \vec{v} = \vec{A}e^{-\Gamma t} + \frac{ie\vec{E}_0}{\omega + i\Gamma} e^{-i\omega t} \longrightarrow \frac{ie\vec{E}_0}{\omega + i\Gamma} e^{-i\omega t}.$$

Předchozí výsledný výraz představuje, obdobně jako tomu bylo u klasického mikroskopického modelu v odstavci 7.1, partikulární řešení pohybové rovnice poté, co „převáží“ nad řešením odpovídající rovnice homogenní. Pro hustotu proudu pak dostaneme

$$\vec{j} = eN_0\vec{v} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -i\omega\varepsilon_0\tilde{\alpha}(\omega)\vec{E},$$

$$\tilde{\alpha}(\omega) = -\frac{e^2 N_0}{\varepsilon m} \cdot \frac{1}{\omega(\omega + i\Gamma)}. \quad (7.2)$$

$$\tilde{\varepsilon}_p(\omega) = 1 - \frac{e^2 N_0}{\varepsilon_0 m} \cdot \frac{1}{\omega(\omega + i\Gamma)} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)}.$$

Jako $\tilde{\varepsilon}_p$ jsme označili komplexní relativní permitivitu plazmových kmitů pro případ vakua. V prostředí o (statické) relativní permitivitě ε_L dostaneme, již po rozšíření do komplexní roviny záměnou $\omega \rightarrow z$,

$$\tilde{\varepsilon}(z) = \varepsilon_L \left(1 - \frac{(\omega'_p)^2}{z(z + i\Gamma)} \right), \quad (\omega'_p) = \frac{\omega_p}{\sqrt{\varepsilon_L}}.$$

Kořeny funkce $\varepsilon(z)$, tj. body větvení funkce $\tilde{n}(z) = \sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)}$ leží v dolní polorovině komplexní roviny, konkrétně

$$z_{1,2} = -\frac{i\Gamma}{2} \pm \sqrt{(\omega'_p)^2 - \frac{\Gamma^2}{4}}.$$

Chování indexu lomu pro $z \rightarrow \infty$ již nemusíme prošetřovat, díky nepřítomnosti kořenů funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$ v horní polorovině. Z obecnějších úvah v odst. 6.4 již víme, že podmínky pro Kramersovy – Kronigovy relace budou splněny i pro funkci $\tilde{n}(z) - 1$.

Kapitola 8

Otevřené problémy

V této kapitole se budeme věnovat některým problémům, které nebyly v předchozím textu uspokojivě, popřípadě dost podrobně, vyřešeny a otázkám, které v oblasti uvedené problematiky zůstávají dosud nezodpovězeny. Očekáváme, že se obsah kapitoly bude měnit podle toho, jak se postupně podaří na jednotlivé otázky odpovídat a jaké budeme dostávat náměty k zamyšlení nad dalšími problémy. Tím také zveme všechny čtenáře k přispění do této diskuse.

8.1 Nutné a postačující podmínky pro Kramersovy – Kronigovy relace

Kramersovy – Kronigovy relace pro restrikcí Laplaceova obrazu $\tilde{\alpha}(\omega)$ odezvové funkce $\alpha(t)$ na reálnou osu jsme odvodili v odst. 6.1 integrací funkce

$$\mathcal{F}(z) = \frac{F(z)}{z - \omega} = \frac{\tilde{\varepsilon}(z) - 1}{z - \omega},$$

dané vztahem 6.4, po křivce na obr. 6.1. Využili jsme přitom těchto vlastností funkce $F(z) = \tilde{\varepsilon}(z)$:

- holomorfnost v horní polorovině komplexní roviny \mathbf{C}_h ,
- vlastnost

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} (|z F(z)|) = 0.$$

První z nich je podmínkou nutnou a postačující k použití Cauchyovy věty, druhá podmínkou postačující pro nulovost integrálu z funkce $\mathcal{F}(z)$ po půlkružnici \mathcal{K}_R v horní polorovině pro $R \rightarrow \infty$. Základními předpoklady pro odezvoovou funkci, z nichž jsme vyšli při důkazu vlastností funkce $\mathcal{F}(z)$, byly

- absolutní integrabilita odezvové funkce $\alpha(t)$ na intervalu $(0, \infty)$,
- absolutní integrabilita její derivace na tomtéž intervalu.

Tyto předpoklady jsme považovali za „rozumné“ z fyzikálních důvodů. Může se však stát, že pro konkrétní fyzikální systém nebudou (nebo třeba jen některý z nich) splněny. Je tedy třeba zjistit, nakolik lze výchozí požadavky na odezvoovou funkci ještě oslabit, aby Kramersovy – Kronigovy relace stále platily. Všimněme si této otázky prozatím jen v několika poznámkách.

Výpočty vycházejícími z konkrétního mikroskopického modelu fyzikálního systému jsme schopni určit odezvu na podnět tvaru rovinné monochromatické vlny, například $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$, a získat tak komplexní funkci reálné proměnné $\tilde{\alpha}(\omega)$. Rozšířením do komplexní roviny, tj. záměnou $\omega \rightarrow z$, získáme funkci $\tilde{\alpha}(z)$, kterou bychom rádi považovali za Laplaceův obraz odezvové funkce $\alpha(t)$ při odezvě typu (5.5). Ten by měl splňovat zcela klíčový fyzikální požadavek – příčinnost. Otázka tedy zní:

Jaké jsou nutné a postačující podmínky kladené na funkci $\tilde{\alpha}(z)$, aby představovala jednostranný Laplaceův obraz jisté funkce $\alpha(t)$? Jaké vlastnosti pak bude mít vzor $\alpha(t)$?

Jestliže se prozatím nevzdáme holomorfnosti funkce $\tilde{\alpha}(z)$, odpovídá na tuto otázku následující věta (viz [2]):

Věta 8.1: Necht' funkce $F(z)$, $z = x + iy$, je holomorfní v polorovině $\mathbf{C}_{\zeta_0} = \{z \in \mathbf{C} | \text{Im } z > \zeta_0\}$. Pak $F(z)$ je jednostranným Laplaceovým obrazem jistého vzoru $f(t)$ právě tehdy, když

$$\sup_{y > \zeta_0} \int_{-\infty}^{\infty} |F(x + iy)|^2 dx < +\infty. \quad (8.1)$$

Pro Laplaceův vzor pak platí

$$\int_0^{\infty} |f(t)|^2 e^{-2\zeta_0 t} dt < +\infty. \quad (8.2)$$

Ihned vidíme, že pro funkci $F(z)$ holomorfní v celé horní polorovině (eventuelně bez reálné osy), tj. pro $\zeta_0 = 0$, dostáváme jako důsledek splnění požadavku (8.1) kvadratickou integrabilitu vzoru $f(t)$. Kvadratická integrabilita je ovšem slabší vlastností než integrabilita absolutní. Příkladem jsou nevládní integrály

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{x+a} dx \quad (\text{diverguje}) \quad \text{a} \quad \int_0^{\infty} \frac{1}{(x+a)^2} dx = \frac{1}{a}.$$

Autor práce [5] nazývá funkci $F(z)$ vyhovující větě 8.1 *kauzální transformací*. S odvoláním na [4] se opírá o tvrzení, že kauzální transformace splňuje *disperzní* (Kramersovy – Kronigovy) relace ve tvaru (6.5), aniž se zabývá chováním funkce $F(z)$ pro $|z| \rightarrow \infty$. Práce [5] se zabývá mj. i otázkou disperzních relací pro nejzajímavější případ funkcí, které jimi mohou být svázány, totiž $\ln \varrho(\omega)$ a $\theta(\omega)$. Příležitostně se k této problematice vrátíme v podrobnější diskusi.

8.2 Co s kořeny komplexní permitivity v horní polovině?

Pro platnost Kramersových – Kronigových relací pro index lomu jsme prozatím předpokládali, že komplexní relativní permitivita $\tilde{\varepsilon}(z)$ nemá v \mathbf{C}_h kořeny. Ty by totiž narušily požadavek holomorfnosti indexu lomu, neboť dávají vznik bodům větvení funkce $\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)}$. Předpokládejme tedy nyní, že funkce $F(z) = \tilde{n}(z) - 1$ má tyto vlastnosti

- je holomorfní v \mathbf{C}_h s výjimkou kořenů funkce $\tilde{\varepsilon}(z)$

$$z_{1,2} = \pm x_0 + i\Gamma, \quad \Gamma > 0,$$

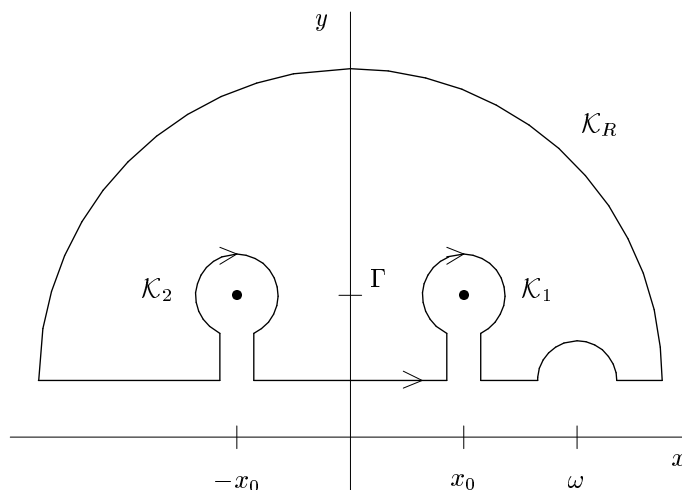
-

$$|\tilde{n}(z) - 1| \sim R^{-1} \quad \text{pro} \quad |z| = R \rightarrow \infty.$$

Pro integrál po křivce na obr. 8.1 platí

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\mathcal{C}} \frac{\tilde{n}(z) - 1}{z - \omega} dz = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{n}(x) - 1}{x - \omega} dx - i\pi[\tilde{n}(\omega) - 1] + \\ &+ (1 - e^{-i\pi}) \left(\int_0^{\Gamma} i \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(x_0 + iy)} - 1}{(x_0 - \omega) + iy} dy + \int_0^{\Gamma} i \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(-x_0 + iy)} - 1}{(-x_0 - \omega) + iy} dy \right) + \\ &+ \int_{\mathcal{K}_1} \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} - 1}{z - \omega} dz + \int_{\mathcal{K}_2} \frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}(z)} - 1}{z - \omega} dz. \end{aligned}$$

Ke Kramersovým – Kronigovým relacím tedy přispívají ještě integrály po svislých úsečkách a kružnicích \mathcal{K}_1 a \mathcal{K}_2 o poloměrech $\varrho \rightarrow 0$.



Obr. 8.1 Integrační křivka pro případ nulových bodů $\tilde{\varepsilon}(z)$ v \mathbf{C}_h

Tento odstavec později doplníme příkladem fyzikálního systému, který má v horní polorovině komplexní roviny kořeny komplexní relativní permitivity.

8.3 Přispějte k diskusi

??

Literatura

- [1] Musilová J., Schmidt E.: *Jak interpretovat odezvové funkce*. Přírodovědecká fakulta UJEP (nyní MU), Brno, 19xx.
<http://www.> (doplnit a dát na stránky).
- [2] Rektorys K. a kol.: *Přehled Užité matematiky*. SNTL, Praha, 1973.
- [3] Šulista M.: *Základy analýzy v komplexním oboru*. Matematika pro vysoké školy technické, sešit XIII, SNTL, Praha, 19xx.
- [4] Titchmarsh E. C.: *Theory of Fourier Integrals*. Second edition. Clarendon Press, Oxford, 1948, pp. 119-128.
- [5] Toll J. S.: *Causality and the Dispersion relation: Logical Foundations*. Phys. Rev. **104** (1956), 6, 1760-1770.
- [6] Veit J.: *Integrální transformace*. Matematika pro vysoké školy technické, sešit XIV, SNTL, Praha, 1983.
- [7] Velický B.: *The use of the Kramers-Kronig relations in determining optical constants*. Czech. J. Phys. **B11** (1961), 787-798.
- [8] Velický B., Tauc J., Trlifaj M., Prosser V.: *Interakce elektromagnetického záření s pevnou látkou*. Ve sborníku: Teorie pevných látek. Přednášky z letní školy o fyzice pevných látek. (Red. E. Antončík.) NČSAV, Praha, 1965.
- [9] Veselago V. G.: *Electrodynamics of substances with simultaneously negative electrical and magnetic permeabilities*. (Doplnit citaci.)