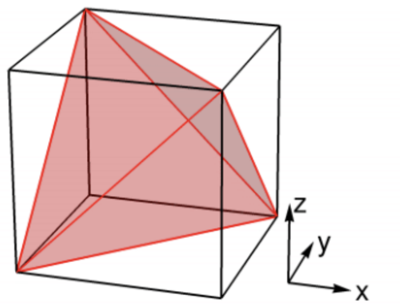
Домашняя работа
Кононов Александр Михайлович
16.11.2024

Условие:

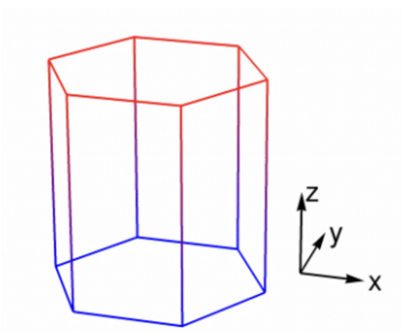
ЗАДАЧА 10 (4 БАЛЛА)

Найти все независимые компоненты тензора нелинейной оптической восприимчивости второго порядка $\chi^{(2)}$ в:

а) Кристаллах со структурой цинковой обманки. Описываются точечной группой симметрии T_d, которая содержит: оси второго порядка C_2, перпендикулярные граням куба, оси третьего порядка C_3 вдоль диагоналей куба, плоскости отражения σ вдоль диагоналей граней куба, а также оси зеркального поворота четвертого порядка S_4, перпендикулярные граням куба.



b) Кристаллах со структурой вюрцита. Описываются точечной группой симметрии C_{6v}, которая содержит: ось поврота шестого порядка C_6 вокруг оси z и вертикальные плоскости отражения. Направления z и $-z$ не эквивалетны.



Решение:

Пункт (а). $\chi^{(2)}_{ijk}$ - всего 27 компонент

Все C_2 - симметрии:

Поворот на π вокруг x:

$$x \to x, \;\; y \to -y, \;\; z \to -z$$

$$p_x \to p_x,\;\; p_y \to -p_y,\;\; p_z \to -p_z$$

$$E_x \to E_x,\;\; E_y \to -E_y,\;\; E_z \to -E_z$$

Получаем:

$$\left.\begin{array}{r} p_x = \chi^{(2)}_{xxy} E_x E_y \\ p_x = \chi^{(2)}_{xxy} E_x (-E_y) \end{array}\right\} \Rightarrow \chi^{(2)}_{xxy} = 0$$

Ан-но:

$$\chi^{(2)}_{xxy} = \chi^{(2)}_{xyx} = \chi^{(2)}_{xxz} = \chi^{(2)}_{xzx} = 0$$

Ан-но π вокруг y:

$$\chi^{(2)}_{yxy} = \chi^{(2)}_{yyx} = \chi^{(2)}_{yxz} = \chi^{(2)}_{yzx} = 0$$

Ан-но π вокруг z:

$$\chi^{(2)}_{zxy} = \chi^{(2)}_{zyx} = \chi^{(2)}_{zxz} = \chi^{(2)}_{zzx} = 0$$

Все C_3 симметрии вокруг диагоналей:

$$x \to y,\;\; y \to z,\;\; z \to x$$

$$\chi^{(2)}_{xyz} = \chi^{(2)}_{yzx} = \chi^{(2)}_{zxy}$$

$$\chi^{(2)}_{xzy} = \chi^{(2)}_{zyx} = \chi^{(2)}_{yxz}$$

$$\chi^{(2)}_{xxx} = \chi^{(2)}_{yyy} = \chi^{(2)}_{zzz}$$

$$\chi^{(2)}_{xyy} = \chi^{(2)}_{yzz} = \chi^{(2)}_{zxx}$$

$$\chi^{(2)}_{xzz} = \chi^{(2)}_{yxx} = \chi^{(2)}_{zyy}$$

Вокруг другой диагонали

$$x \to -z,\;\; y \to x,\;\; z \to -y$$

Получаем:

$$\chi^{(2)}_{iii} = \chi^{(2)}_{ijj} = 0$$

Отражение σ отн диагонали грани

$$x \to x,\;\; y \to z,\;\; z \to y$$

Тогда все $\chi^{(2)}_{ijk}$ с разными индексами равны. По сути это можно переписать через перестановку индексов:

$$\chi^{(2)}_{xyz} = \chi^{(2)}_{\sigma\{x;y;z\}}$$

Ответ:

$$\chi^{(2)}_{xyz} = \chi^{(2)}_{\sigma\{x;y;z\}}$$

$$\chi^{(2)}_{iii} = \chi^{(2)}_{\sigma\{i;i;j\}} = 0$$

Один линейно-независимый элемент
Пункт (б) я не решал