

К. К. АЛТУНИН

ОПТИКА НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

**ЧАСТЬ 1
МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ
УРАВНЕНИЯ
ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ**



К. К. Алтунин

**ОПТИКА НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ.
ЧАСТЬ 1.
МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ
УРАВНЕНИЯ
ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ**



Москва 2014

УДК 535.3
ББК В22.31
А52

*Печатается по решению Редакционно-издательского совета
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
профессионального образования "Ульяновский государственный
педагогический университет имени И. Н. Ульянова"*

Рецензенты:

В. А. Сергеев — профессор, д.т.н.
В. М. Журавлёв — профессор, д. ф.-м. н.
С. В. Червон — профессор, д. ф.-м. н.

Алтунин К. К.

А52 Оптика наноструктур и наноматериалов. Часть 1.
Микроскопические уравнения электродинамики:
учебное пособие. 2-е изд. / К. К. Алтунин. — М.: Директ-
Медиа, 2014. — 82 с.

ISBN 978-5-4475-0322-2

Учебное пособие посвящено современным представлениям о нелокальных уравнениях электродинамики, которые могут быть применены вместо уравнений Максвелла при решении различных граничных задач оптики. Вывод нелокальных уравнений производится на основе полуклассического и квантово-электродинамического подходов. С учётом различных типов квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов получены различные нелокальные уравнения распространения электромагнитных волн в спиновых системах, в диэлектриках и в металлах. Нелокальные полевые уравнения применены для решения ряда типовых граничных задач оптики в полубесконечных средах и в малых объектах, линейные размеры которых значительно меньше длины световой волны. Особое внимание уделено оптическим ближнепольным резонансам, которые образуются в наноструктурных системах. Рассмотрены приложения полученных результатов в оптической ближнепольной микроскопии.

Учебное пособие предназначено для студентов и аспирантов физических специальностей университетов. Книга может быть также полезна исследователям и преподавателям.

УДК 535.3
ББК В22.31

© Алтунин К. К., текст, 2014
ISBN 978-5-4475-0322-2 © Издательство «Директ-Медиа», макет, оформление, 2014

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики	11
1. Введение.....	11
2. Матрица эффективной энергии взаимодействия двух водородоподобных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга.....	16
3. Переход к двухкомпонентным волновым функциям	25
4. Роль внешнего поля во взаимодействии двух атомных электронов	30
4.1. Учёт промежуточных состояний с отрицательной энергией.....	32
4.2. Промежуточные состояния с положительными энергиями	36
5. Поляризуемые поля в системе водородоподобных атомов, излучающих или поглощающих фотоны.....	36
5.1. Интегральные уравнения распространения фотонов в электродипольной оптической среде	43
5.2. Интегральное уравнение распространения фотонов в системе электронных спинов	45
6. Полуклассический метод вывода нелокальных уравнений	50

6.1. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в диэлектриках.....	52
6.2. Уравнения распространения электромагнитных волн в квадрупольных и магнитодипольных средах.....	58
6.3. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в проводящей среде	60
Приложение А.....	67
Приложение В. Полевые уравнения микроскопической электродинамики	69
Приложение С. Поле электрического диполя	75
Список литературы.....	79

Введение

Основной целью настоящей работы является представление единого теоретического подхода для решения широкого круга задач, встречающихся в оптике наноструктурных систем. В настоящей работе будет показано, что адекватность этого теоретического подхода подтверждается прецизионными экспериментами. В настоящей работе дан строгий вывод основных уравнений, на основе которых решены различные граничные задачи оптики наноструктурных систем. При этом конечные формулы имеют ясный физический смысл и могут быть рекомендованы для теоретического расчёта различных приборов и устройств на основе наноструктурных систем.

Конструирование любого оптического прибора или устройства основано на формулах Френеля, которые связывают между собой амплитуды внешней, отражённой и преломлённой волн. Поражает воображение точность этих формул, которая подтверждается многими прецизионными экспериментами и нарушаются эти формулы лишь в небольшой окрестности угла Брюстера θ_B , определяемого из равенства $\operatorname{tg} \theta_B = n$, где n — показатель преломления оптической среды. Для объяснения этого расхождения с формулами Френеля в настоящей работе представлена микроскопическая теория переходного слоя на поверхности изотропного непоглощающего диэлектрика.

Эта теория позволяет объяснить многочисленные прецизионные эксперименты по брюстеровскому отражению света, и основана эта теория на решении нелокальных уравнений электродинамики, представленных в настоящей работе. Таким образом, на решении оптической задачи был апробирован представленный в настоящей работе теоретический подход, что позволяет применять его для решения и других оптических задач. К таким задачам, безусловно, можно отнести граничные задачи оптики, в которых учитывается влияние дискретного распределения атомов и наночастиц на границе раздела двух сред и в слоистых средах. Решению такого рода задач и посвящена настоящая работа.

Среди многообразия известных в настоящее время наноструктурных систем особое место занимают двухатомные объекты, например, димеры на поверхности твёрдых тел, атом-зонд вблизи атома образца и т.д. Взаимодействие атомов при межатомных расстояниях порядка 1 нм во внешнем поле излучения необходимо исследовать без теории возмущений, учитывая большие внутренние поля, которые могут значительно превышать внешние поля, а также выделяя определённый тип квантовых переходов с соответствующими квантовыми правилами отбора. Глубокое исследование двухатомных наноструктурных объектов в значительной степени определяет понимание оптических свойств многоатомных наноструктурных объектов.

В системе двух взаимодействующих дипольных осцилляторов во внешнем поле оптического излучения возникают два или четыре оптических размерных резонанса в зависимости от того, являются ли дипольные осцилляторы одинаковыми или разными, а также в зависимости от поляризации внешнего излучения по отношению к оси наноструктурного двухатомного объекта. Частоты оптических размерных резонансов сильно зависят от межатомного расстояния. При этом на малых, порядка 1 нм, расстояниях частоты оптических размерных резонансов отличаются от собственных частот дипольных осцилляторов на величину, значительно (примерно в 10^5 раз) превышающую времена затухания осцилляторов. При больших межатомных расстояниях, сравнимых с длиной волны внешнего оптического излучения, частоты оптических размерных резонансов отличаются от собственных частот осцилляторов на величину порядка времени затухания осцилляторов. Взаимодействие двухатомного наноструктурного объекта с внешним оптическим излучением характеризуется диагональным тензором эффективной поляризуемости, который отличается от классической поляризуемости изолированных атомов, составляющих наноструктурный объект, как по величине, так и зависимостью от частоты. Оптические размерные резонансы образуются и в трёхатомных наноструктурных объектах.

По-видимому, такие резонансы должны проявляться в различных наноструктурных объектах, состоящих из небольшого числа атомов, где влиянием статистического усреднения индуцированных дипольных моментов атомов можно пренебречь.

Свойства оптических размерных резонансов будут рассмотрены в квантовых наноструктурных объектах на примере двухатомных систем. Будет показано, что оптические размерные резонансы в таких системах могут сильно зависеть от вероятности обнаружения атомов в возбуждённых состояниях. При учёте насыщения квантовых переходов в наноструктурных объектах проявляются нелинейные оптические размерные резонансы. Можно сформулировать условие применимости линейного приближения, когда ролью насыщения квантовых переходов можно пренебречь и оптические размерные резонансы являются линейными. При этом смещение частот оптических размерных резонансов по отношению к частоте перехода в спектре взаимодействующих атомов определяется в случае одинаковых атомов характерной частотой резонансной передачи энергии между атомами, которая определяет расщепление энергии симметричного и антисимметричного состояний взаимодействующих атомов.

Будет рассмотрено в настоящей работе ближнепольное взаимодействие нанопара с поверхностью твёрдого тела при наличии на поверхности инородных тел, например, островковых плёнок для объяснения экспериментов по ближнепольной оптической микроскопии.

В частности, будет проанализирована задача взаимодействия нанопара, активированного примесными атомами, с полубесконечным диэлектриком. В настоящей работе будет рассмотрена задача о взаимодействии двух нанопар, и будет показано, что в таком наноструктурном объекте возникают ближне-польные оптические резонансы, обусловленные как кулоновским, так и запаздывающим взаимодействием атомов внутри нанопар, так и взаимодействием атомов, принадлежащих разным нанопарам.

В последнее время большое внимание уделяется так называемым метаструктурным системам, состоящим из наноструктурных объектов. Примером такой системы может являться система примерно из 10^3 активированных нанопар, которую предлагается использовать для оптического квантового компьютера. В настоящей работе будут рассмотрены некоторые метаструктурные системы из наночастиц. Мы покажем, что такие системы обладают уникальными оптическими свойствами при отражении и преломлении света. Важное значение в оптике наноструктур имеет эффект оптического просветления наноструктурного слоя и границы раздела двух сред.

Как будет показано в настоящей работе, изменение структуры монослоя наночастиц приводит к кардинальному изменению отражения света от границы раздела двух сред в широком диапазоне длин волн. Граница раздела может превращаться либо в идеальное зеркало, либо становиться абсолютно прозрачной, когда отражательная способность границы меняется от нуля до единицы при соответствующей структуре слоя наночастиц. Получено условие идеального оптического просветления, при выполнении которого монослой наночастиц представляет собой

идеальное просветляющее покрытие, позволяющее снизить до нуля отражательную способность границы полубесконечной (поглощающей или непоглощающей) оптической среды во всём видимом диапазоне длин волн. При этом в слое наночастиц возбуждаются световые волны, распространяющиеся вдоль слоя, а пропускательная способность границы раздела двух сред становится больше единицы. Выведены формулы для амплитуд отражённой и прошедшей волн, а также для амплитуды световой волны в наноструктурном слое, которые в предельном случае отсутствия слоя переходят в известные формулы Френеля. На основе полученных формул, как показано в настоящей работе, можно конструировать различные оптические приборы и устройства.

Некоторые из возможных приложений этих формул и эффекта оптического просветления подробно рассмотрены в настоящей работе. Одно из важных применений эффекта оптического просветления связано с реализацией технологии невидимости непрозрачных тел в результате обтекания тел световыми волнами.

Будем придерживаться схемы изложения, в которой вначале выводятся полевые и материальные уравнения для описания наноструктурных систем. Далее будут представлены решения некоторых граничных задач оптики, а затем будут рассмотрены некоторые приложения полученных решений.

Глава 1. Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики

1. Введение

Закон Кулона определяет энергию взаимодействия e^2/r двух электронов, находящихся на расстоянии r друг от друга, которое должно быть меньше некоторого характерного пространственного масштаба, когда скорости движения зарядов v пренебрежимо малы по сравнению со скоростью света c , т.е. $v/c \rightarrow 0$. Это имеет место, например, для системы нейтральных атомов (взаимодействие Ван-дер-Ваальса), находящихся на расстоянии, которое меньше характерных длин волн λ_0 в спектре взаимодействующих атомов ($r \ll \lambda_0$). В этом случае в зависимости от мультипольности квантовых переходов между состояниями атомов оператор межатомного взаимодействия пропорционален либо $(1/r^3)$ (диполь-дипольное взаимодействие), либо $(1/r^4)$ (диполь-квадрупольное взаимодействие) и т.д. Энергия взаимодействия двух нейтральных атомов в S-состояниях пропорциональна $(1/r^6)$ [1]. Если же один из атомов находится в основном состоянии, а второй — в возбуждённом, то потенциальная энергия взаимодействия пропорциональна $(1/r^3)$ [1], а время передачи взаимодействия от одного атома к другому является конечным [2] и значительно большим времени пролёта фотона t_p расстояния r ($t_p = r/c$).

При описании взаимодействия атомов, находящихся на расстояниях $r > \lambda_0$, применение закона Кулона оказывается недостаточным. Здесь наряду с кулоновским взаимодействием зарядов необходимо учитывать запаздывающее взаимодействие, зависящее от скорости света и исчезающее при $c \rightarrow \infty$.

Влияние запаздывающего взаимодействия на поведение системы электрических движущихся зарядов в рамках классической электродинамики было прослежено в работах Борна и Эвальда [3]. В [4, 5] представлена функция Лагранжа системы взаимодействующих движущихся зарядов с точностью до v^2/c^2 . Учёт эффектов запаздывания в системе взаимодействующих атомов потребовал определенного пересмотра существующих методов. Функции Лагранжа и Гамильтона системы взаимодействующих атомов с точностью до членов порядка v^2/c^2 были получены в [6-8].

Методами квантовой электродинамики взаимодействие между свободными электронами с учетом запаздывания рассматривалось в работах [9, 10]. На языке квантовой электродинамики запаздывающее взаимодействие возникает за счёт обмена между зарядами поперечными виртуальными фотонами, в то время как кулоновское взаимодействие обусловлено обменом продольными и скалярными фотонами [11]. Случай двух взаимодействующих электронов в атоме гелия был исследован Брейтом [11, 12].

Оператор Брейта имеет вид:

$$B = \frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{2r} \left[\boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1 \mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha}_2 \mathbf{r})}{r^2} \right], \quad (1.1)$$

где $\boldsymbol{\alpha}_1$ и $\boldsymbol{\alpha}_2$ — матрицы Дирака [11] электронов. Первый член в (1.1) представляет собой энергию кулоновского взаимодействия электронов. Второй член учитывает поправки, возникающие вследствие движения электронов и учета электронных спинов. Применение оператора Брейта ограничивается не слишком большим расстоянием между электронами. Поэтому к проблеме двух электронов, принадлежащих двум атомам, находящимся на произвольном расстоянии друг от друга, потребовалось вернуться вновь в начале 70-х годов в связи с интенсивным исследованием многоатомных систем в поле излучения. Квантово-электродинамическое рассмотрение взаимодействия двух электронов, принадлежащих двум водородоподобным атомам, находящимся на произвольных расстояниях друг от друга, впервые было исследовано в работе [13], а затем в работе [7]. В работе [13] в электрическом дипольном приближении с учётом только орбитальных степеней свободы электронов был выведен оператор электрического диполь-дипольного взаимодействия двух атомных электронов.

В работе [7] было проведено более общее по сравнению с [13] рассмотрение и на основе эффектов второго порядка квантовой электродинамики, включающих виртуальный обмен фотонами всех поляризаций, был выведен следующий оператор:

$$U^{(2)} = e^2 \exp\left(\frac{i\omega_0 a}{c}\right), \quad (1.2)$$

$$\left\{ \frac{1}{r} + \frac{a(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{r^2} - \frac{(\mathbf{a}_1 \mathbf{n})(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{2r} - \frac{a^2 (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) - 3(\mathbf{a}_1 \mathbf{n})(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{2r^3} \right\}$$

где a — межатомное расстояние, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, ω_0 — собственная частота в спектре взаимодействующих атомов. Первое слагаемое в (1.2) представляет собой энергию кулоновского взаимодействия двух атомных электронов, а остальные учитывают поправки, возникающие вследствие движения связанных электронов, находящихся на дальних расстояниях друг от друга по сравнению с $\lambda_0 = 2\pi c / \omega_0$. При $a \rightarrow 0$ операторы (1.2) и (1.1) совпадают. Ниже будет дан подробный вывод оператора (1.2) с обсуждением его физического смысла.

Следующий шаг в решении проблемы двух электронов был связан с учетом поля реальных фотонов. В работах [14, 15] эта задача рассматривалась для свободных электронов, а в работе [16] — для двух электронов в гелиеподобном атоме с учётом заданного поля ядра атома. В работах [6, 7] вначале на основе полуклассического подхода, а затем на основе квантово-электродинамического подхода была решена задача взаимодействия двух атомных электронов, принадлежащих двум водородоподобным атомам, находящимся на произвольном расстоянии друг от друга. При этом рассматривались эффекты 3-го порядка кванто-

вой электродинамики, где составной частью являются процессы, соответствующие оператору (1.2). Важным результатом в решении этой задачи являются формулы для поляризующих полей в системе двух водородоподобных атомов, с помощью которых удалось вывести нелокальные уравнения распространения фотонов в различных средах в зависимости от типов квантовых переходов и промежуточных состояний в спектре взаимодействующих атомов. В настоящей работе будут представлены различные нелокальные уравнения с подробным обсуждением их физического смысла. Учитывая сложность уравнений Максвелла и их локальность, не всегда удается найти на их основе соответствующее решение. В настоящей работе будут рассмотрены некоторые типы задач, которые успешно решаются с помощью нелокальных уравнений. Можно сказать, что на основе нелокальных уравнений сделан существенный прорыв в решении ряда важных проблем классической, нелинейной и квантовой оптики, а именно при выводе формул для показателя преломления оптических сред внутри среды и на её поверхности, при выводе формул для амплитуд оптических полей в различных точках наблюдения внутри и вне оптических сред, при решении проблемы граничных условий, при построении теории переходного слоя на поверхности оптических сред, при решении ряда задач в оптике малых объектов, размеры которых значительно меньше длины световой волны.

В данной главе будет соблюдаться следующая схема изложения. Вначале будут рассмотрены эффекты третьего порядка квантовой электродинамики для описания процессов взаимодействия двух водородоподобных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга. На основе решения этой задачи будет

представлен метод вывода различных нелокальных уравнений для различных степеней свободы атомных электронов. Далее будет представлен также полуклассический метод вывода нелокальных уравнений. Будут выведены различные нелокальные уравнения электродинамики для переменных квантованных и классических полей.

2. Матрица эффективной энергии взаимодействия двух водородоподобных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга

Диаграммы Фейнмана для взаимодействия двух электронов во внешнем поле представлены на рис. 1.

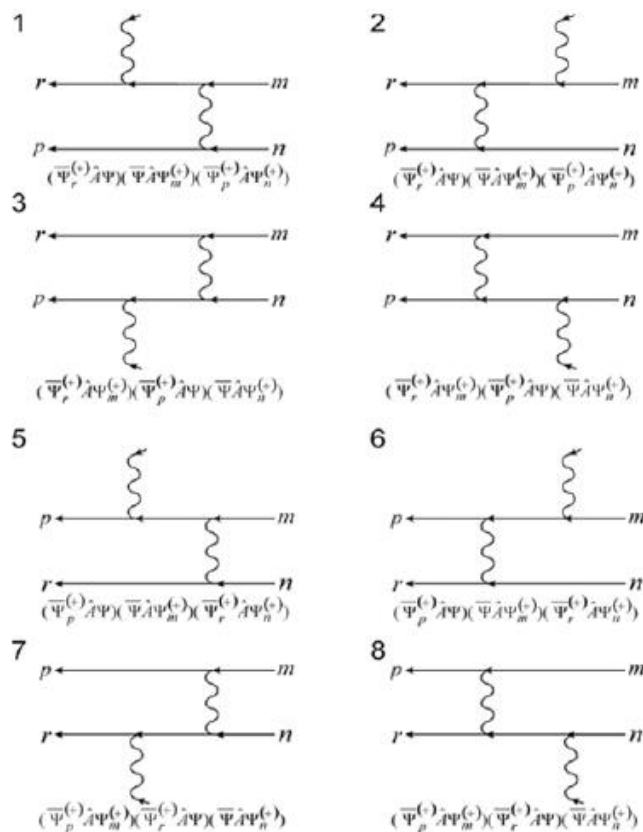


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана e^-e^- – взаимодействия двух атомов с излучением или поглощением фотона.

После интегрирования в S-матрице по времени, частотам и волновым векторам виртуальных фотонов получим следующую матрицу эффективной энергии взаимодействия двух атомных электронов $\hbar = c = 1$:

$$\begin{aligned}
U_{i \rightarrow f}^{(3)} = e^3 \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}''' & \left\{ -\frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}]|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}') \Psi_i(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_i(\mathbf{r}'') \gamma_\mu^* \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \times \right. \\
& \times \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_m^{(+)}} \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_i(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_i(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_p^{(+)}} \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_p(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_i(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_i^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_n^{(+)}} \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_p(\mathbf{r}'') \gamma_\mu^* \Psi_i(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_i^{(+)}(\mathbf{r}''') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}'') + \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_n^{(+)}]|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_p^{(+)}} \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}') \Psi_i(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_i(\mathbf{r}'') \gamma_\mu^* \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_r^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_m^{(+)}} \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_i(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_i(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_p^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_m(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_i(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \Psi_i(\mathbf{r}''') \gamma_\mu^* \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''}| \sum_{i\pm} \frac{\exp\{i[\omega_p^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_i(1-i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \bar{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_\mu^* \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}'') \gamma_\mu^* \Psi_i(\mathbf{r}'') \times \\
& \times \bar{\Psi}_i(\mathbf{r}''') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}'') \} \quad (2.1)
\end{aligned}$$

где $\omega_n^{(+)}$, $\omega_m^{(+)}$ — частоты начальных состояний электронов, $\omega_p^{(+)}$, $\omega_r^{(+)}$ — частоты их конечных состояний, $\Psi_{m(n)}^{(+)}$ — решения уравнения Дирака для электрона с положительной частотой, $\bar{\Psi}_{p(r)}^{(+)} = \Psi_{p(r)}^{(+)*} \gamma_4$, $\Psi_{p(r)}^{(+)*}$ — сопряжённая волновая функция, $\gamma_4 = \beta$, $j = 1, 2, 3$, $\gamma = -i\beta\alpha$,

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где σ — матрицы Паули. Штриховые индексы, сопровождающие радиус-векторы $\mathbf{r}$ и γ -матрицы, соответствуют различным волновым функциям взаимодействующих частиц. При этом γ -матрицы с различными штриховыми индексами коммутируют между собой. Суммирование в (2.1) производится по всем промежуточным состояниям с положительными и отрицательными частотами. Состояния электрона с отрицательными частотами будем рассматривать как позитронные состояния, не переходя к волновой функции позитрона, содержащей преобразование зарядового сопряжения. Это связано с тем, что суперпозиция состояний с противоположными знаками заряда не может образовать общего решения уравнения Дирака [11]. В данном случае будет использовано следующее решение:

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_r a_r \Psi_r^{(+)} + \sum_r b_r^+ \Psi_r^{(-)}, \\ \bar{\Psi} &= \sum_r a_r^+ \bar{\Psi}_r^{(+)} + \sum_r b_r \bar{\Psi}_r^{(-)} \end{aligned}, \quad (2.1a)$$

где a_r , a_r^+ , b_r , b_r^+ — операторы вторичного квантования электрон-позитронного поля. Переход от $S_{i \rightarrow f}^{(3)}$ к матрице эффективной энергии взаимодействия (2.1) произведен с помощью следующего равенства:

$$\begin{aligned} S_{i \rightarrow f}^{(3)} &= -2\pi i U_{i \rightarrow f}^{(3)} \delta \\ &\left(\omega_r^{(+)} - \omega_m^{(+)} - \omega + \omega_p^{(+)} - \omega_n^{(+)} \right), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где знак перед частотой оптического фотона ω указывает на то, что в операторе векторного потенциала

$\hat{A} = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} A_{\mu}$ выделена отрицательно-частотная часть, пропорциональная оператору уничтожения фотона данной моды.

Рассмотрим первое слагаемое в (2.1) и выделим в этом слагаемом множитель, отвечающий за обмен виртуальными фотонами между двумя электронами. Представим расстояние между электронами следующим образом:

$$|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| \approx a \left(1 + \frac{\mathbf{a} \Delta \xi}{a^2} + \frac{M_1}{a} \right), \quad (2.3)$$

где $a = |\mathbf{a}'' - \mathbf{a}'''|$ — расстояние между атомами, $\Delta \xi = \xi'' - \xi'''$, здесь ξ'', ξ''' — смещения электронов в атомах относительно своих ядер, $M_1 = M_1(\mathbf{a}, \Delta \xi)$ — поправочные члены, включающие в себя более высокие степени отношения $\Delta \xi / a$. Перейдём к системе единиц, в которой $c \neq 1$, и предположим, что

$$\frac{1}{c} \left| \omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)} \right| \frac{\Delta \xi}{a} \ll 1. \quad (2.4)$$

При этом расстояние между ядрами может изменяться в широких пределах: $|\Delta \xi| \leq a \leq \infty$.

Тогда получим

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} \exp \left\{ \frac{1}{c} \left| \omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)} \right| |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| \right\} = \\ & = \frac{1}{a} \exp \left\{ \frac{1}{c} \left| \omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)} \right| a \right\} \frac{1}{1 + (\mathbf{a} \Delta \xi) / a^2 + M_1 / a} \times \\ & \times \left\{ 1 + \frac{1}{c} \left| \omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)} \right| \left(\frac{\mathbf{a} \Delta \xi}{a} + M_1 \right) - \frac{1}{2c^2} \left(\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)} \right)^2 \left(\frac{\mathbf{a} \Delta \xi}{a} + M_1 \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.3a)$$

Исключим частоты в выражении (2.3a), используя уравнения $H''' \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') = \omega_n^{(+)} \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''')$.

Получим, что имеет место следующее преобразование:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} \exp \left\{ \frac{1}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| \right\} \Rightarrow \\
& \Rightarrow \frac{1}{a} \exp \left\{ \frac{1}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| a \right\} \left\{ \left[1 + \frac{\mathbf{a} \Delta \xi}{a^2} + \frac{M_1}{a} \right]^{-1} + \right. \\
& \left. + \frac{i}{c} [f_1, H'''] + \frac{i}{2c^2} [H'', [H''', f_2]] \frac{\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}}{\omega_l - \omega_m^{(+)}} \right\}, \quad (2.5)
\end{aligned}$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned}
f_1 &= a - \frac{a^2}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|}, \\
f_2 &= a |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| + \frac{a^3}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} - 2a^2
\end{aligned} \quad (2.6)$$

Как видно из (2.3а), в нашем рассмотрении наряду с разложением по степеням $1/c$ применяется разложение по малому параметру $\Delta \xi / a$. При этом в разложении по степеням $1/c$ мы ограничиваемся квадратичными членами по $1/c$, а в разложении по малому параметру $\Delta \xi / a$ каких-либо ограничений нет, так как функция M_1 содержит все высшие поправочные члены. В этом легко убедиться, подставляя в (2.6) разложение (2.3) и сравнивая (2.5) с (2.3а). Таким образом, все последующее рассмотрение учитывает взаимодействие двух атомных электронов произвольной мультипольности.

Операторы Гамильтона отдельных атомов с неподвижными ядрами имеют вид:

$$\begin{aligned} H'' &= c\alpha''\mathbf{p}'' + \gamma_4''mc^2 - \frac{Z_1e^2}{\xi''}, \\ H''' &= c\alpha'''\mathbf{p}''' + \gamma_4'''mc^2 - \frac{Z_2e^2}{\xi'''}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\mathbf{p}'', \mathbf{p}'''$ — операторы импульса электронов, Z_1, Z_2 — заряды точечных ядер. Вычислим коммутаторы в (2.5), полагая, что ядра атомов неподвижны. Тогда при $\hbar \neq 1$ имеем соотношения:

$$\begin{aligned} [f, H'''] &= -i\hbar ca^2 \frac{(\alpha''\mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|}, \\ [H'', [H''', f_2]] &= ac^2 [\alpha''\mathbf{p}'', [\alpha''\mathbf{p}'', |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|]] + \\ &+ a^3 c^2 \left[\alpha''\mathbf{p}'', \left[\alpha''\mathbf{p}'', \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|} \right] \right]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Таким образом, оператор, описывающий обмен виртуальными фотонами в матрице (2.1), примет следующий вид:

$$\begin{aligned} B_{ll}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') &= e^2 \exp \left\{ \frac{1}{c} [\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}] a \right\} \left\{ \frac{1 - (\alpha''\alpha''')}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|} + a \frac{(\alpha''\mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|^2} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} R_{ll} \left(\frac{(\alpha''\alpha''') - (\alpha''\mathbf{n})(\alpha'''\mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|} - a^2 \frac{(\alpha''\alpha''') - 3(\alpha''\mathbf{n})(\alpha'''\mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|^3} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где

$$R_{ll} = \frac{\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}}{\omega_l - \omega_m^{(+)}}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''|}.$$

В частном случае резонансного обмена фотонами имеем $R_{ll} = 1$, и оператор (2.8) переходит в соответствующий оператор [4]. При $a \rightarrow 0$ и $R_{ll} = 1$

оператор (2.9) совпадает с оператором Брейта (1.1). Рассмотрим физический смысл разложения (2.5). В системе зарядов с непрерывным энергетическим спектром при получении функции Лагранжа с точностью до $(v/c)^2$ [4] используется единый временной масштаб R/c , где R — расстояние между зарядами. Это разложение запаздывающих потенциалов по степеням R/c возможно, если предположить, что распределение зарядов не успевает заметно измениться за время R/c . Очевидно, что это условие является очень жёстким, если рассматриваются протяжённые системы. При выводе оператора Брейта [11] в системе двух электронов с дискретным энергетическим спектром в качестве параметра разложения использовалась величина $\omega_0 r/c \ll 1$, где ω_0 — характерная частота в спектре взаимодействующих электронов, r — расстояние между электронами. Таким образом, наряду со временем $T_e = R/c$ использовалось также характерное время $T_a = 2\pi/\omega_0$. При этом $2\pi T_e \ll T_a$. Очевидно, что данное условие выполнено для не слишком больших расстояний между электронами, например, для внутриатомных расстояний в гелиеподобных атомах. Разложение (2.5) справедливо для двух атомных электронов, находящихся на произвольно больших расстояниях, поскольку в качестве параметра разложения выбрана величина (2.4). При этом время $T_e = a/c$ значительно больше характерного внутриатомного временного масштаба T_a . Это приводит к дополнительному запаздыванию во взаи-

модействии электронов, что описывается дополнительными членами в операторе (2.9).

Известно, что характерные частоты атомных электронов находятся в диапазоне от нескольких мегагерц до 10^9 МГц, если принимать во внимание тонкое и сверхтонкое расщепления атомных уровней, а также оптические переходы. В связи с этим возникает вопрос о выборе характерного внутриатомного масштаба времени T_a . Очевидно, что для полного учёта эффекта запаздывания во взаимодействии электронов необходимо в качестве характерных частот выбирать наибольшие частоты в спектре взаимодействующих электронов, т.е. оптические частоты. Как будет показано ниже, оператор (2.9) соответствует различным типам взаимодействия двух электронов, и наличие единого временного масштаба T_a объясняет тот факт, что, например, в спин-спиновом взаимодействии электронов появляются дополнительные по сравнению с [11] запаздывающие члены, хотя спиновые переходы соответствуют радиочастотному диапазону.

Рассмотрим теперь остальные члены матрицы (2.1), соответствующие остальным диаграммам Фейнмана (рис. 1). Используя ту же процедуру перехода от частот к операторам, получим операторы B_{sl} ($s = 2, 3, \dots, 8$), аналогичные оператору B_{ll} . При этом операторы B_{sl} будут содержать различные коэффициенты, определяющие разность начальных, конечных и промежуточных частот, а также различные факторы запаздывания в соответствии с расположением волновых функций в (2.1). Эффекты третьего порядка (см. рис. 1) проходят с выполнением закона

сохранения (2.2). Для излучения реального фотона знак перед частотой ω в (2.2) следует заменить на противоположный. Таким образом, для энергий взаимодействующих электронов имеем уравнение:

$$E_r^{(+)} - E_m^{(+)} + E_p^{(+)} - E_n^{(+)} \pm \hbar\omega = 0. \quad (2.10)$$

В соответствии с этим законом сохранения можно выделить некоторые схемы квантовых переходов. Для этого выделим некоторые два состояния, например, p и n , в спектре взаимодействующих атомов и предположим, что их начальные состояния n и m одинаковы.

Схема А. Обмен виртуальными фотонами с частотой $\omega'' = \omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}$ приводит к переходу одного из атомов (например, первого атома) в промежуточное состояние ω_l , а затем в исходное состояние $E_m^{(+)}$, т.е. $E_r^{(+)} = E_m^{(+)}$. При этом второй атом меняет своё квантовое состояние: $E_n^{(+)} \rightarrow E_p^{(+)}$, и в результате в системе из двух атомов испускается или поглощается один фотон. Фактор запаздывания для этого типа взаимодействия равен $\exp\left\{(1/c)\left|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}\right|a\right\}$. Местоположение акта излучения (поглощения) реального фотона может не совпадать с местоположением атома, совершающего квантовый переход $E_n^{(+)} \rightarrow E_p^{(+)}$. Такая схема квантовых переходов соответствует диаграммам 1, 2 и 7, 8 на рис. 1.

Схема В. Для диаграмм 1-8 возможны переходы, в результате которых излучается или поглощается фотон удвоенной энергии. При этом оба атома меняют

свои квантовые состояния, т.е. в этом случае $E_r^{(+)} \neq E_m^{(+)}$ и $E_p^{(+)} \neq E_n^{(+)}$.

Схема С. При $E_r^{(+)} = E_m^{(+)}$, когда своё квантовое состояние меняет лишь один из атомов с излучением или поглощением реального фотона с энергией $\hbar\omega = |E_p^{(+)} - E_n^{(+)}|$, возможно взаимодействие с фактором запаздывания, равным единице. Такими свойствами обладают диаграммы 3-6.

Природа квантовых переходов в схемах *A*, *B* и *C* определяется свойствами операторов B_{sl} и $\hat{A}$, а также волновых функций и значений энергии атомных электронов.

3. Переход к двухкомпонентным волновым функциям

Переход к двухкомпонентным волновым функциям $\Phi_n^{(+)}$ осуществляется с помощью следующих преобразований [11]:

$$\Psi_n^{(+)} = \begin{pmatrix} \varphi_n^{(+)} \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}}{2mc} \varphi_n^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

$$\varphi_n^{(+)} = \left(1 - \frac{p^2}{8m^2 c^2}\right) \Phi_n^{(+)}$$

Применим эти преобразования для вычисления матричного элемента

$$\langle \Psi_l^*(\mathbf{r}'') \Psi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') | B_{ll} | \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') \rangle, \quad (3.2)$$

входящего в первое слагаемое матрицы (2.1). Рассмотрим матричный элемент оператора $1/|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|$

в (2.9). В качестве промежуточных состояний выберем в (3.2) состояния с положительной энергией. Тогда, применяя (3.1), получим следующее выражение:

$$\begin{aligned}
& e^2 \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \int \left\{ \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') \Phi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \right. \\
& - \frac{1}{8m^2c^2} \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') \Phi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') [\mathbf{p}''' \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}''')] - \\
& - \frac{1}{8m^2c^2} \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') \Phi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}'') [\mathbf{p}''' \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}''')] + \\
& + \frac{1}{8m^2c^2} \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') [\mathbf{p}'''^2 \Phi_p^{(+)}(\mathbf{r}''')]^* \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \\
& + \left. \frac{1}{8m^2c^2} [\mathbf{p}'''^2 \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'')] \Phi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') \right\} \frac{d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|},
\end{aligned} \tag{3.3}$$

где отброшены члены, содержащие $1/c$ в более чем второй степени. Преобразуем теперь выражение (3.3) так, чтобы оно приняло вид:

$$\int \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') \Phi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') V_1^{(+)} \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') \equiv (V_1^{(+)})_{lp, mn} \tag{3.4}$$

и найдем при этом явный вид оператора $V_1^{(+)}$. Для преобразования (3.3) к виду (3.4) необходимо интегрировать по частям. Расположим начало системы координат в точке a'' , полагая, что координаты $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{r}''$ относятся к первому атому, а координаты $\mathbf{r}'''$ — ко второму. Учтём, что волновые функции атомов не перекрываются и обращаются в нуль на бесконечности. Это означает, что, в отличие от случая [11], степени величин $1/|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|$ не обращаются в бесконечность при изменении $\mathbf{r}''$ и $\mathbf{r}'''$ в пределах размеров взаимодействующих атомов. С учетом сделанных замечаний получим следующий оператор:

$$V_{ll}^{(+)} = e^2 \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \frac{1}{r}, \quad (3.5)$$

$$r = |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|$$

Этот оператор есть аналог кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга. При $a \rightarrow 0$ этот член превращается в обычное кулоновское взаимодействие электронов. Рассмотрим теперь матричный элемент от остальных членов оператора B_{ll} с помощью двухкомпонентных волновых функций $\Phi_n^{(+)}$. Подставляя волновые функции (3.1) в матрицу (2.1) и перемножая матрицы в подынтегральном выражении, имеем, что во всех получающихся членах достаточно заменить φ на Φ , так как они уже содержат множитель $1/c^2$. Проведем преобразования, аналогичные тем, которые были использованы при получении оператора (3.5). При этом можно выделить операторы, содержащие разные степени $1/r$. Оператор, пропорциональный $1/r^3$, имеет вид [17]:

$$V_{2l}^{(+)} = \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \times \\ \times \left\{ \frac{1}{r^3} [(\boldsymbol{\sigma}'' \boldsymbol{\sigma}''') - 3(\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}''' \mathbf{n})] + R_{ll} \frac{a^5}{r^5} [15(\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}''' \mathbf{n}) - 9(\boldsymbol{\sigma}'' \boldsymbol{\sigma}''')] \right\}, \quad (3.6)$$

при $a \rightarrow 0$ оператор (3.6) переходит в оператор спин-спинового взаимодействия двух электронов [11]. Для электронов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга, согласно условию (2.4), возникает дополнительное запаздывание, которое

определяется фактором запаздывания $\exp\left\{\left(1/c\right)\left|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}\right|a\right\}$, а также дополнительными членами в (3.6). В частном случае резонансного взаимодействия двух электронов без излучения или поглощения фотона $R_{ll} = 1$.

Оператор, пропорциональный $1/r$, после необходимых преобразований примет следующий вид [17]:

$$\begin{aligned}
 V_{3l}^{(+)} = & \exp\left\{\frac{i}{c}\left|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}\right|a\right\} \frac{e^2}{m^2 c^2} \left\{ \left(\frac{1}{2}R_{ll} - 1\right) \frac{1}{r} (\mathbf{p}'' \mathbf{p}''') - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2}R_{ll} \frac{1}{r} \mathbf{n}(\mathbf{n} \mathbf{p}'') \mathbf{p}''' - \frac{1}{2}R_{ll} \frac{a^2}{r^3} [(\mathbf{p}'' \mathbf{p}''') - 3\mathbf{n}(\mathbf{n} \mathbf{p}'') \mathbf{p}'''] \right\} + \\
 & + \exp\left\{\frac{i}{c}\left|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}\right|a\right\} \frac{e^2 a}{mc} \frac{1}{r^2} (\mathbf{n} \mathbf{p}'').
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

При $a \rightarrow 0$ и $R_{ll} = 1$ оператор (3.7) переходит в соответствующий оператор запаздывающего взаимодействия двух электронов в гелиеподобном атоме [11]. Поэтому оператор (3.7) будем называть *оператором запаздывающего взаимодействия двух электронов*, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга. При $R_{ll} = 1$ (резонансное взаимодействие двух электронов) оператор (3.7) можно получить из классической функции Гамильтона системы атомов, заменяя импульсы электронов на соответствующие операторы импульсов [6].

Члены, пропорциональные $1/r^2$, в матричных элементах оператора B_{ll} имеют вид [17]:

$$V_{4l}^{(+)} = \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \left\{ \left(\frac{1}{2}R_{ll} - 1\right) \frac{1}{r^2} (2\sigma''[\mathbf{np}'''] - 2\sigma'''[\mathbf{np}'']) + \right. \quad (3.8)$$

$$\left. + \frac{1}{2}R_{ll} \frac{1}{r^2} (2\sigma''[\mathbf{np}''] + 2\sigma'''[\mathbf{np}'''] - 2\sigma''[\mathbf{np}'''] - 2\sigma'''[\mathbf{np}'']) + 3R_{ll} \frac{a^2}{r^4} \sigma''[\mathbf{np}''] \right\}.$$

При $a \rightarrow 0$ и $R_{ll} = 1$ оператор (3.8) переходит в соответствующий оператор спин-орбитального взаимодействия двух электронов в операторе Брейта [11]. Поэтому оператор (3.8) будем называть *оператором спин-орбитального взаимодействия* двух атомных электронов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга.

Рассмотрим взаимодействие двух электронов через поле виртуальных фотонов, учитывая только орбитальные степени свободы. Этой части взаимодействия соответствует оператор $V_{ll}^{(+)} + V_{3l}^{(+)}$. Как было отмечено выше, вывод оператора взаимодействия двух атомов учитывает переходы в спектре атомов произвольной мультипольности.

Учитывая лишь линейные по смещениям ξ'' и ξ''' члены в разложении функций $1/r$ и $1/r^2$, получим следующий оператор [17]:

$$V_{ll}^{(+)} + V_{3l}^{(+)} = \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \times \quad (3.9)$$

$$\times \left\{ \frac{(\mathbf{d}''\mathbf{d}''') - 3(\mathbf{nd}'')(\mathbf{nd}''')}{a^3} + \frac{e}{mc} \frac{(\mathbf{d}'''\mathbf{p}'') - 3(\mathbf{nd}''')(\mathbf{np}'')}{a^2} + \right.$$

$$+ \frac{e^2}{m^2 c^2} \left[\left(\frac{1}{2}R_{ll} - 1\right) \frac{(\mathbf{p}''\mathbf{p}''')}{a} - \frac{1}{2}R_{ll} \frac{(\mathbf{np}'')(\mathbf{np}''')}{a} - \right.$$

$$\left. \left. - \frac{1}{2}R_{ll} \frac{(\mathbf{p}''\mathbf{p}''') - 3(\mathbf{np}'')(\mathbf{np}''')}{a} \right] \right\},$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{a}/a$ и $\mathbf{d}'' = e\xi''$, $\mathbf{d}''' = e\xi'''$ — операторы электрических дипольных моментов отдельных атомов. Оператор (3.9) представляет собой оператор электрического диполь-дипольного взаимодействия двух нейтральных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга, при переходе одного из атомов в некоторое промежуточное состояние, когда взаимодействие (3.9) является составной частью процесса излучения или поглощения реального фотона. В частном случае взаимодействия двух атомов без излучения или поглощения реального фотона оператор (3.9) соответствует эффекту второго порядка квантовой электродинамики, для которого выполняется закон сохранения энергии: $E_r^{(+)} - E_m^{(+)} + E_p^{(+)} - E_n^{(+)} = 0$. В этом случае в операторе (3.9) следует положить $R_{ll} = 1$, и оператор (3.9) переходит в соответствующий оператор [11].

4. Роль внешнего поля во взаимодействии двух атомных электронов

Применим преобразование (3.1) для перехода от волновых функций Ψ к двухкомпонентным волновым функциям Φ в матричных элементах типа

$$\left\langle \bar{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \left| e\hat{\mathbf{A}}'(\mathbf{r}') \right| \Psi_l^{(+)}(\mathbf{r}') \right\rangle, \quad (4.1)$$

входящих в матрицу (2.1). Матричные элементы (4.1) от оператора векторного потенциала внешнего поля определяют взаимодействие двух атомных электронов с полем реальных фотонов. Рассмотрим вначале матричные элементы (4.1) для переходов атомных электронов через промежуточные состояния с положительными энергиями. После необходимых преоб-

разований в матричном элементе (4.1) для перехода атома из состояния $\Phi_l^{(+)}(\mathbf{r}')$ в состояние $\Phi_r^{(+)}(\mathbf{r}')$ выделим следующий оператор перехода:

$$R_1^+ = eA'_4(\mathbf{r}'). \quad (4.2)$$

Члены, пропорциональные $1/c$, имеют вид:

$$R_2^+ = -\frac{ie}{2mc}(\mathbf{p}'\mathbf{A}') - \frac{ie}{2mc}(\mathbf{A}'\mathbf{p}') - \frac{i\hbar e}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{H}'), \quad (4.3)$$

где $\mathbf{A}'(\mathbf{r}')$ — оператор векторного потенциала внешнего поля в месте расположения электрона с радиус-вектором $\mathbf{r}'$, $\mathbf{H}'(\mathbf{r}')$ — соответствующий оператор напряжённости магнитного поля ($[\nabla'\mathbf{A}'] = \mathbf{H}'$).

Оператор R_3^+ , содержащий $1/c$ во второй степени, имеет вид:

$$R_3^{(+)} = -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}(\Delta'A'_4) - \frac{i\hbar e}{4m^2c^2}(\nabla'A'_4)\mathbf{p}' + \frac{e}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{p}')A'_4(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{p}'). \quad (4.4)$$

Члены, пропорциональные $1/c^3$, в операторе перехода имеют следующий вид:

$$R_4^{(+)} = \frac{e}{16m^3c^3} \left\{ i(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{A}')(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{p}')\mathbf{p}'^2 - i\mathbf{p}'^2(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{A}')(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{p}') + \hbar \sum_a \sigma'_a \left(\boldsymbol{\sigma}' \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial x'_a} \right) \mathbf{p}'^2 + \right. \\ \left. + i\boldsymbol{\sigma}'(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{A}')\mathbf{p}'^3 - \hbar \sum_a \sigma'_a \mathbf{p}'^2 \left(\boldsymbol{\sigma}' \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial x'_a} \right) - i\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{p}'^2(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{A}')\mathbf{p}' \right\}, \quad (4.5)$$

где $\alpha = x, y, z$. Каждый из полученных операторов перехода может вызвать квантовый переход атомного электрона из некоторого промежуточного состояния

$\Phi_i^{(+)}(\mathbf{r}')$ в конечное состояние $\Phi_r^{(+)}(\mathbf{r}')$, если атомный электрон оказался в промежуточном состоянии благодаря обмену виртуальными фотонами с электроном из другого атома. При этом квантованное внешнее поле излучения имеет потенциал A'_4 , равный нулю. Для внешнего постоянного поля член (4.2) отличен от нуля, и в этом случае взаимодействие электронов из двух разных атомов через поле виртуальных фотонов происходит с выполнением следующего закона сохранения:

$$E_r^{(+)} - E_m^{(+)} + E_p^{(+)} - E_n^{(+)} = 0.$$

4.1. Учёт промежуточных состояний с отрицательной энергией

В матрице эффективной энергии взаимодействия (2.1) содержится суммирование по промежуточным состояниям взаимодействующих электронов с отрицательными энергиями. Это означает, что в энергии взаимодействия двух электронов присутствует часть, обусловленная влиянием позитронных состояний в спектре взаимодействующих электронов. Данное влияние входит косвенным образом через промежуточные виртуальные состояния электронов. При этом начальные и конечные состояния являются электронными состояниями с положительной энергией.

Учёт позитронных промежуточных состояний может быть произведен при переходе к двухкомпонентным волновым функциям в (2.1) с использованием волновых функций вида:

$$\Psi_l^{(-)} = \begin{pmatrix} -\frac{\sigma \mathbf{p}}{2mc} \chi_l^{(-)} \\ \chi_l^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

$$\chi_l^{(-)} = \left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2 c^2} \right) \Phi_l^{(-)}.$$

При этом можно не переходить к волновой функции позитрона, содержащей преобразование зарядового сопряжения [11]. Однако выберем другой путь учёта промежуточных позитронных состояний, основанный на следующих очевидных условиях.

Во-первых, энергия фотонов $\hbar\omega$ значительно меньше энергии поля электронов и энергии электронов мало отличаются от их энергии покоя. Следовательно, в (2.1) положим, что

$$\hbar[\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_r^{(+)}] \approx -2mc^2 \quad (4.7)$$

и т.д.

Во-вторых, введём проекционные операторы

$$\Lambda'_- = \frac{mc^2 - H'}{2mc^2},$$

$$\Lambda''_- = \frac{mc^2 - H''}{2mc^2}, \quad (4.8)$$

обладающие следующими свойствами:

$$\Lambda'_- \Psi_l(\mathbf{r}') = \Psi_l^{(-)}(\mathbf{r}'),$$

$$\Lambda''_- \Psi_l(\mathbf{r}'') = \Psi_l^{(-)}(\mathbf{r}''). \quad (4.9)$$

Тогда выделим в первом и втором слагаемых матрицы (2.1) следующий оператор:

$$P_{1l}^{(+)} = \frac{e}{2mc^2} \quad (4.10)$$

$$(\gamma'_4 \gamma'_\delta A'_\delta \Lambda'_{-} B_{1l} - B_{2l} \Lambda''_{-} A''_\delta \gamma''_4 \gamma''_\delta)$$

где $\delta = 1, 2, 3, 4$, A'_δ — 4-оператор векторного потенциала внешнего поля в месте расположения электрона с радиус-вектором $\mathbf{r}'$.

Аналогичным образом можно попарно объединить и остальные члены матрицы (2.1). Преобразуем теперь оператор (4.10), применяя волновые функции (3.1) для электронных начальных и конечных состояний. Величины R_{1l} и R_{2l} уже содержат множитель $1/(2mc^2)$, поэтому операторы B_{1l} и B_{2l} имеют усеченный вид. Перемножим операторы в (4.10) в матричном виде и двухкомпонентные волновые функции взаимодействующих электронов, оставляя члены, пропорциональные $1/c$.

Выполняя интегрирование по частям там, где это необходимо, получим следующий оператор из (4.10):

$$\begin{aligned} P_1^+ = & \frac{e^3}{2mc^2} \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\right\} \times \\ & \times \left\{ -\frac{i\hbar}{2mc} \frac{a}{r^2} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n}) \sum_a \sigma'_a \frac{\partial A'_4}{\partial x'_a} - \frac{1}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}') (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n}) \frac{a}{r^2} A' + \right. \\ & + \frac{i\hbar}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}') (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{p}'') \frac{1}{r} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}') \boldsymbol{\sigma}'' \sum_a \sigma''_a \sigma'''_a \left(\frac{1}{r} \frac{\partial A''_4}{\partial x''_a} + \frac{n_a}{r^2} \right) - i (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}') (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{n}) \frac{a}{r^2} + \\ & + \frac{1}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}') (\boldsymbol{\sigma}'' \boldsymbol{\sigma}''') (\boldsymbol{\sigma}''' \mathbf{p}''') \frac{1}{r} + \frac{1}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}') (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}') \frac{1}{r} + \frac{1}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n}) (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{p}'') \frac{a}{r^2} A''_4 - \\ & - \frac{1}{2mc} \frac{a}{r^2} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n}) (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{p}'') A''_4 + \frac{\hbar}{2mc} \sum_a (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{A}'') \sigma'_a \frac{n_a}{r^2} + \frac{i}{2mc} \frac{1}{r} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}') (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{A}'') + \\ & \left. + \frac{i}{2mc} \frac{1}{r} \boldsymbol{\sigma}' (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{A}'') \boldsymbol{\sigma}'' (\boldsymbol{\sigma}''' \mathbf{p}''') - i \frac{a}{r^2} (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n}) (\boldsymbol{\sigma}'' \mathbf{A}'') \right\}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

где операторы σ' , σ'' действуют на спинорные волновые функции электрона первого атома, а оператор σ''' — на спинорные функции электрона второго атома. Применим следующие тождества:

$$\begin{aligned}\sigma'''(\sigma'''p''') &= -(\sigma'''p''')\sigma''' + p''', \\ (\sigma'''p''')\frac{1}{r} &= \frac{1}{r}(\sigma'''p''') - i\hbar\frac{(\mathbf{n}\sigma''')}{r^2}, \\ (\sigma''\mathbf{A}'')(\sigma''\sigma''')(\sigma'''p''') &= \\ &= (\mathbf{A}''p''') + i\sigma''[\mathbf{A}''p'''] - ip''[\mathbf{A}''\sigma''] + \\ &+ \sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_{\alpha} \sigma''_{\alpha} A''_{\beta} p''_{\beta} - \sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_{\alpha} p''_{\alpha} A''_{\beta} \sigma''_{\beta}.\end{aligned}\quad (4.12)$$

Предположим, что взаимодействие двух атомных электронов происходит в переменном внешнем поле и оператор векторного потенциала удовлетворяет условию Лорентца $\partial A_{\mu} / \partial x_{\mu} = 0$, $\mu = 1, 2, 3, 4$.

В этом случае можно положить [11]

$$A'_4 = 0, \quad \frac{\partial A'_4}{\partial x_4} = 0. \quad (4.13)$$

Тогда оператор (4.11) примет следующий вид:

$$\begin{aligned}P_1^+ &= \frac{e^3}{2mc^2} \exp\left\{\frac{i}{c}[\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}]a\right\} \times \\ &\times \left\{-2i(\mathbf{A}''\mathbf{n}'')\frac{a}{r^2} + 2\sigma''[\mathbf{A}''\mathbf{n}] \frac{a}{r^2} + \frac{\hbar}{mc}(\mathbf{A}''\mathbf{n})\frac{1}{r^2} + \frac{i\hbar}{mc}\sigma''[\mathbf{A}''\mathbf{n}]\frac{1}{r^2} + \right. \\ &+ \frac{i}{2mc}\frac{1}{r}(\mathbf{p}''\mathbf{A}'') - \frac{1}{2mc}\frac{1}{r}\sigma''[\mathbf{p}''\mathbf{A}''] + \frac{i}{mc}\frac{1}{r}(\mathbf{A}''\mathbf{p}'') - \\ &\left. - \frac{i}{2mc}\frac{1}{r}\left(\sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_{\alpha} \sigma''_{\alpha} A''_{\beta} p''_{\beta} - \sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_{\alpha} p''_{\alpha} A''_{\beta} \sigma''_{\beta}\right)\right\}.\end{aligned}\quad (4.14)$$

Аналогичным образом преобразуем остальные слагаемые матрицы (2.1) и соответствующие операторы для промежуточных состояний с отрицательными энергиями, обозначая их через P_2^+ , P_3^+ и P_4^+ . Физический смысл этих операторов обсудим ниже.

4.2. Промежуточные состояния с положительными энергиями

Рассмотрим в матрице эффективной энергии взаимодействия суммирование по промежуточным состояниям с положительной энергией, т.е. по электронным состояниям l_+ . Применим те же преобразования матричных элементов, которые были проделаны в разделах 4 и 3 с использованием приближенных волновых функций (3.1). Тогда первые два члена матрицы (2.1), соответствующие диаграммам 1 и 2 на рис. 2.1, с одинаковыми факторами запаздывания $\exp\left\{(1/c)\left|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}\right|a\right\}$ примут следующий вид:

$$A_{i \rightarrow f}^{(3)} = \sum_{s,s'} \sum_{l_+} \left\{ \frac{\langle \Phi_r^{(+)} | R_s^{(+)} | \Phi_l^{(+)} \rangle \langle \Phi_l^{(+)} \Phi_p^{(+)} | V_{s'l1}^{(+)} | \Phi_m^{(+)} \Phi_n^{(+)} \rangle}{\hbar [\omega_l(1-i0) + \omega - \omega_r^{(+)}]} + \right. \quad (4.15)$$

$$\left. + \frac{\langle \Phi_r^{(+)} \Phi_p^{(+)} | V_{s'l2}^{(+)} | \Phi_l^{(+)} \Phi_n^{(+)} \rangle \langle \Phi_l^{(+)} | R_s^{(+)} | \Phi_m^{(+)} \rangle}{\hbar [\omega_l(1-i0) - \omega - \omega_m^{(+)}]} \right\},$$

где операторы $V_{s'l1}^{(+)}$ и $V_{s'l2}^{(+)}$ получены из соответствующих операторов B_{l1} и B_{l2} . При перемножении различных матричных элементов в (4.15) отброшены члены, содержащие $1/c$ в более чем третьей степени.

5. Поляризуемые поля в системе водородоподобных атомов, излучающих или поглощающих фотоны

Операторы (4.3), (4.4) и (4.5), соответствующие эффектам первого порядка, содержат в себе в качестве сомножителей атомные и полевые операторы, вызывающие квантовые переходы между атомами и

фотонными состояниями в одной и той же точке наблюдения. Иная ситуация имеет место для взаимодействия двух атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга, с операторами (4.14) или матричными элементами (4.15). В различных членах оператора (4.14) можно выделить оператор, действующий в некоторой точке наблюдения, и оператор, действующий в месте расположения другого атома, формирующего поляризующее поле. При этом поляризующее поле не является полем реальных фотонов, а является полем виртуальных фотонов. Аналогичным образом в матричных элементах типа (4.15) содержится зависимость от координат двух атомов, один из которых располагается в точке наблюдения.

Рассмотрим поляризующие поля, которые формируются по схеме C из раздела 2.1, когда в результате обмена виртуальными фотонами и излучения или поглощения одного реального фотона меняется квантовое состояние лишь одного из атомов. Предположим, что местоположение первого атома определяется радиус-вектором $\mathbf{r}_1$ (координаты $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{r}''$), а местоположение второго — $\mathbf{r}_2$ (координаты $\mathbf{r}'''$). Начальное состояние первого атома определяется индексом m с энергией $E_m^{(+)}$, а начальное состояние второго атома — индексом n с энергией $E_n^{(+)}$. В результате обмена виртуальными фотонами первый атом оказывается в некотором промежуточном состоянии $E_l^{(+)}$ или $E_l^{(-)}$ и затем возвращается в исходное состояние, т.е. $E_r^{(+)} = E_m^{(+)}$. Происходит поглощение одного реального фотона в месте расположения первого атома, а второй атом при этом изменяет свое квантовое

состояние и переходит на уровень $E_p^{(+)} = E_n^{(+)}$. Такая схема квантовых переходов соответствует первому члену матрицы (2.1) и диаграмме 1 (см. рис. 2.1). Аналогичная ситуация имеет место и для второго члена (2.1) с диаграммой Фейнмана 2 (см. рис. 2.1), когда поглощение фотона происходит не в месте расположения атома, совершающего переход $E_n^{(+)} \rightarrow E_p^{(+)}$, а в месте расположения другого атома, формирующего поляризующее поле. Остальные члены матрицы (2.1) с соответствующими диаграммами 3-8 не участвуют в формировании поляризующего поля по рассматриваемой схеме. Действительно, при равенстве индексов $r = m$ каждый из этих членов содержит равные нулю матричные элементы типа $\langle \Psi_r^{(+)} | \gamma'_\mu | \Psi_m^{(+)} \rangle$.

Запишем в явном виде векторные потенциалы поляризующих полей, используя (4.14) и (4.15). Для этого необходимо выделить определенный тип квантовых переходов между состояниями взаимодействующих атомов, например, орбитальные квантовые переходы. Тогда для эффектов первого порядка получим для каждого из атомов в соответствии с (4.3) следующий оператор Гамильтона:

$$H_1''' = -\frac{e}{mc} \mathbf{p}''' \mathbf{A}''', \quad (5.1)$$

где $\mathbf{A}'''$ — оператор векторного потенциала внешнего поля излучения в месте расположения второго атома.

С помощью оператора (4.14) запишем следующий оператор Гамильтона:

$$H_2''' = -\frac{e}{mc} \mathbf{p}''' \mathbf{A}^{(p)}, \quad (5.2)$$

$$\mathbf{A}^{(p)} = -\frac{e^2}{2mc^2} \frac{1}{r} \exp\left(\frac{i}{c} \omega_0 a\right) \mathbf{A}'' ,$$

где $\omega_0 = \omega_p^{(+)} - \omega_n^{(+)}$ — частота перехода $p \rightarrow n$.

Поляризующее поле $\mathbf{A}^{(p)}$ будем называть *позитронным поляризующим полем*. Поляризующее поле (5.2) обусловлено исчезновением фотона в месте расположения второго атома, в то время как поглощение фотона происходит в месте расположения первого атома. Другие члены оператора (4.14), соответствующие орбитальным квантовым переходам, отличаются от (5.2) своими физическими свойствами. Так, член типа $\mathbf{p}'' \mathbf{A}''$ соответствует позитронному поляризующему полю, но при этом исчезновение фотона и его поглощение происходят в одном и том же месте. Таким образом, учёт позитронных промежуточных состояний во взаимодействии двух атомных электронов приводит к возникновению дополнительного гамильтониана взаимодействия атомных электронов с внешним полем. В результате к внешнему полю $\mathbf{A}'''$ следует добавлять позитронное поляризующее поле $\mathbf{A}^{(p)}$ при рассмотрении взаимодействия системы атомных электронов с внешним полем.

Рассмотрим роль взаимодействия (4.15) через промежуточные состояния с положительными энергиями, учитывая только орбитальные квантовые переходы.

Подставив в (4.15) операторы (4.3) и (3.9), получим следующий гамильтониан взаимодействия [17]:

$$H_3''' = -\frac{e}{mc} \mathbf{p}''' \mathbf{A}^{(e)}, \quad (5.3)$$

где $\mathbf{A}^{(e)}$ — векторный потенциал электронного поляризуемого поля;

$$\begin{aligned} A^{(e)} = & \exp\left(\frac{1}{c}\omega_0 a\right) \sum_{l_r} \left(\frac{(\mathbf{p}'_{rl} \mathbf{A}')}{\hbar[\omega_l(1-i0)+\omega-\omega_r^{(+)}]} \times \right. \\ & \times \left\{ \frac{e}{im\omega_0} \frac{\mathbf{d}''_{lm} - 3(\mathbf{d}''_{lm} \mathbf{n})\mathbf{n}}{a^3} + \frac{e^2}{im^2 c \omega_0} \frac{\mathbf{p}''_{lm} - 3(\mathbf{p}''_{lm} \mathbf{n})\mathbf{n}}{a^2} \right. \\ & \left. \left. + \frac{e^2}{m^2 c^2} \left[\left(\frac{1}{2} R_{1l} - 1 \right) \frac{1}{a} \mathbf{p}''_{lm} - \frac{1}{2} R_{1l} \frac{(\mathbf{n} \mathbf{p}''_{lm})\mathbf{n}}{a} - \frac{1}{2} R_{1l} \frac{\mathbf{p}''_{lm} + 3(\mathbf{n} \mathbf{p}''_{lm})\mathbf{n}}{a} \right] \right\} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\hbar[\omega_l(1-i0)+\omega-\omega_r^{(+)}]} \times \right. \\ & \times \left\{ \frac{e}{im\omega_0} \frac{\mathbf{d}'_{rl} - 3(\mathbf{d}'_{rl} \mathbf{n})\mathbf{n}}{a^3} + \frac{e^2}{im^2 c \omega_0} \frac{\mathbf{p}'_{rl} - 3(\mathbf{p}'_{rl} \mathbf{n})\mathbf{n}}{a^2} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{e^2}{m^2 c^2} \left[\left(\frac{1}{2} R_{2l} - 1 \right) \frac{1}{a} \mathbf{p}'_{rl} - \frac{1}{2} R_{2l} \frac{(\mathbf{n} \mathbf{p}'_{rl})\mathbf{n}}{a} - \frac{1}{2} R_{2l} \frac{\mathbf{p}'_{rl} + 3(\mathbf{n} \mathbf{p}'_{rl})\mathbf{n}}{a} \right] \right\} (\mathbf{p}''_{rl} \mathbf{A}'') \right), \end{aligned} \quad (5.4)$$

где

$$R_{1l} = \frac{\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}}{\omega_l - \omega_m^{(+)}}, \quad R_{2l} = \frac{\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}}{\omega_l - \omega_r^{(+)}}.$$

Электронное поляризуемое поле (5.4) записано в электрическом дипольном приближении с использованием оператора (3.9) для учёта обмена виртуальными фотонами. При этом в (5.4) операторы $\mathbf{A}'$ и $\mathbf{A}''$ были вынесены за знак матричного элемента в этом приближении. Электронное поляризуемое поле (5.4) формируется двумя атомами, и при этом один из атомов в результате последовательности рассматриваемых квантовых переходов оказывается в исходном квантовом состоянии. Это означает, что в фор-

муле (5.4) можно выделить среднее значение электрического дипольного момента этого атома в некотором состоянии $r = m$.

Запишем выражение для среднего значения дипольного момента $\mathbf{d}'_m$, вычисленное в первом порядке теории возмущений [2]:

$$\mathbf{d}'_m = \frac{e}{m\hbar} \exp(-i\omega t) \times \sum_{l \neq m} \left\{ \frac{\mathbf{d}'_{ml}(\mathbf{p}'_{lm}\mathbf{A}'_0)}{\omega_{lm} - \omega + (i/2)(\Gamma_l + \Gamma_m)} + \frac{(\mathbf{p}'_{lm}\mathbf{A}'_0)\mathbf{d}'_{ml}}{\omega_{lm} + \omega - (i/2)(\Gamma_l + \Gamma_m)} \right\}, \quad (5.5)$$

где ω_{lm} — частота перехода, $\Gamma_{l(m)}^{-1}$ — время жизни состояния $l(m)$, $\mathbf{A}' = \mathbf{A}'_0 \exp(-i\omega t)$. В формуле (5.5) оставлена только отрицательно-частотная часть, соответствующая процессу поглощения фотона, при котором формируется поляризующее поле (5.4). Используя выражение (5.5), получим вместо (5.4) следующую формулу (индекс m опущен):

$$A^{(e)} = \frac{c}{i\omega_0} \frac{[\mathbf{d}'] - 3([\mathbf{d}']\mathbf{n})\mathbf{n}}{a^3} + \frac{e}{im\omega_0} \frac{[\mathbf{p}'] - 3([\mathbf{p}']\mathbf{n})\mathbf{n}}{a^2} - \frac{i\omega_0}{c} \frac{([\mathbf{d}']\mathbf{n})\mathbf{n}}{a} - \frac{e}{mc} \frac{[\mathbf{p}']}{a}, \quad (5.6)$$

где символ [...] означает, что среднее значение величины берётся в момент времени $t' = t - (a/c)(\omega_0/\omega)$. Здесь использовано свойство изотропности атомов, в соответствии с которым величины типа $(\mathbf{p}'_{rl}\mathbf{A}')\mathbf{d}'_{ml}$ и $\mathbf{p}'_{rl}(\mathbf{d}'_{ml}\mathbf{A}')$ равны между собой. Перейдём от векторных потенциалов (5.2) и (5.3) поляризующих полей к соответствующим напряжённости электрического и магнитного полей, используя условие Лорентца

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} = 0.$$

Для поля излучения, пропорционального $\exp(-i\omega t)$, имеем

$$\mathbf{E}^{(e)} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}^{(e)}, \quad \mathbf{E}^{(p)} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}^{(p)}, \quad (5.7)$$

где векторные потенциалы $\mathbf{A}^{(e)}$ и $\mathbf{A}^{(p)}$ пропорциональны оператору $c_{\mathbf{k}\lambda}^v$ уничтожения фотона с волновым вектором $\mathbf{k}$ и индексом поляризации $\lambda = 1, 2$ в месте расположения атома, создающего поляризующее поле (атом-поляризатор). При этом квантовый переход $p \rightarrow n$ осуществляется в месте расположения другого атома — атома-наблюдателя, находящегося на произвольном расстоянии от атома-поляризатора.

Рассмотрим случай, когда частота ω внешнего поля излучения близка к одной из частот $\omega_{lm} > 0$. Тогда среднее значение импульса равно

$$[\mathbf{p}'] = \frac{im}{e} \omega_0 [\mathbf{d}'],$$

и оператор напряжённости электронного поляризующего поля согласно (5.6) примет следующий вид:

$$E^{(e)} = \text{rot rot} \frac{[\mathbf{d}']}{a}, \quad (5.8)$$

где дифференцирование ведётся по координатам точки наблюдения a''' . Аналогичным образом, используя обычное соотношение между векторным потенциалом и напряжённостью магнитного поля [11], определим напряжённости магнитного поля $\mathbf{H}^{(e)}$ и $\mathbf{H}^{(p)}$.

5.1. Интегральные уравнения распространения фотонов в электродипольной оптической среде

Введем дипольную α_d и импульсную α_p поляризуемости атома с помощью следующих соотношений:

$$\mathbf{d}' = \alpha_d \mathbf{A}', \quad \mathbf{p}' = \alpha_p \mathbf{A}', \quad (5.9)$$

где $\mathbf{d}'$ и $\mathbf{p}'$ — средние значения дипольного момента и импульса в некотором состоянии m , вычисленные в первом порядке теории возмущений. В соответствии с формулой (5.5) можно определить дипольную поляризуемость изотропного атома. Для определения импульсной поляризуемости α_p в формуле (5.5) следует заменить матричные элементы $\mathbf{d}'_{lm}$ на матричные элементы $\mathbf{p}'_{lm}$ оператора импульса. Тогда векторный потенциал электронного поляризующего поля примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(e)} = & \left\{ \alpha_d \frac{c}{i\omega_0} \frac{\mathbf{e} - 3(\mathbf{e}\mathbf{n})\mathbf{n}}{a^3} + \alpha_p \frac{e}{im\omega_0} \frac{\mathbf{e} - 3(\mathbf{e}\mathbf{n})\mathbf{n}}{a^2} - \right. \\ & \left. - \alpha_d \frac{i\omega_0}{c} \frac{(\mathbf{e}\mathbf{n})\mathbf{n}}{a} - \frac{e}{mc} \alpha_p \frac{\mathbf{e}}{a} \right\} [A'] \equiv \mathbf{K}_e(a', a'') [A'], \end{aligned} \quad (5.10)$$

где $\mathbf{e}$ — единичный вектор вдоль направления поля $\mathbf{A}'$

Переход к N -атомной системе можно осуществить путём суммирования векторных потенциалов (5.10), (5.2) поляризующих полей, создаваемых $N-1$ атомами в месте расположения атома с радиус-вектором $\mathbf{a}''$.

В такой системе атомов можно оценить роль электронного и позитронного поляризующих полей, сравнивая члены, пропорциональные $1/a$ в (5.10), с

векторным потенциалом (5.2). При этом следует обратить внимание на то обстоятельство, что электронное поляризующее поле содержит поляризуемости α_d и α_p , которые зависят от случайного распределения собственных частот ω_0 вследствие неоднородного уширения, а позитронное поляризующее поле от этого уширения не зависит. Это приводит к тому, что электронное и позитронное поляризующие поля при определенных условиях в N -атомной системе могут быть сравнимы по абсолютной величине.

Перейдём к оптической среде, полагая, что она является непрерывной. Для этого введём концентрацию N/V распределения атомов в среде. Более того, предположим, что поляризующие поля (5.10) и (5.2) будут пропорциональны не внешнему полю, а полю внутри среды. Это позволит нам записать следующее интегральное уравнение для оператора напряжённости электрического поля [17]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \int \frac{N}{V} \mathbf{K}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}') E\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right) dV' + \\ & + \int \frac{N}{V} \mathbf{K}_p(R) E\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right) dV', \end{aligned} \quad (5.11)$$

$\mathbf{r}$ — радиус-вектор точки наблюдения, $\mathbf{r}'$ — радиус-вектор некоторой точки внутри среды либо на ее поверхности, $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — оператор напряжённости внешнего электрического поля, представленный в виде суперпозиции плоских волн с амплитудами $c_{\mathbf{k}\lambda}^v$ [11], не зависящими от координат; $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$,

$$\mathbf{K}_p(R) = -\frac{e^2}{2mc^2} \frac{1}{R}. \quad (5.12)$$

Аналогичным образом можно записать интегральное уравнение для оператора напряженности магнитного поля, применяя оператор rot к векторным потенциалам (5.10), (5.2).

Если точка наблюдения $\mathbf{r}$ находится вне рассматриваемой среды, то интеграл в (5.11) берется по всей среде. Если она расположена внутри среды, то необходимо вначале исключить небольшую область, занятую атомом, обнесенную сферой малого радиуса. Уравнение (5.11) в частном случае отсутствия позитронной поляризации среды и выделения лишь одной собственной частоты в спектре атомов совпадает с интегро-дифференциальным уравнением классической оптики [18], если от операторов в (5.10) перейти к соответствующим классическим полям.

5.2. Интегральное уравнение распространения фотонов в системе электронных спинов

Рассмотрим еще один пример интегрального уравнения, которое можно вывести с помощью предлагаемого в данной главе метода. В отличие от предыдущего случая будем рассматривать только спиновые степени свободы взаимодействующих электронов различных одноэлектронных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга. Такая ситуация представляет интерес, например, для магнитооптики, в лазерах без инверсии, в процессах лазерного охлаждения атомов и т.д. Предположим, что спиновые переходы осуществляются между состояниями атомов, разделенными оптической частотой ω_0 . Такие спиновые переходы могут

происходить независимо от электрических дипольных переходов, рассмотренных в разделе 5.1.

Применим оператор (3.6), а также оператор

$$(R_2^{(+)})_{\sigma} = -\frac{i\hbar e}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{H}') \quad (5.13)$$

для описания поляризующих полей в системе электронных спинов. При этом будем рассматривать ту же, что и в разделе 5.1, схему квантовых переходов.

Подставим операторы (3.6) и (5.13) в матрицу (4.15). Это позволит нам получить следующий оператор взаимодействия:

$$\mathbf{H}_3''' = -\frac{\hbar e}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}'''\mathbf{H}^{(e)}), \quad (5.14)$$

где напряжённость магнитного поля есть

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)} = & \exp\left(\frac{1}{c}\omega_0 a\right) \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \sum_{l+} \left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}_{rl}'\mathbf{H}')}{\hbar[\omega_l(1-i0)+\omega-\omega_r^{(+)}]} \times \right. \\ & \times \left\{ \frac{\boldsymbol{\sigma}_{lm}'' - 3(\boldsymbol{\sigma}_{lm}''\mathbf{n})\mathbf{n}}{r^3} + 15\frac{a^2}{r^5} R_{ll}(\boldsymbol{\sigma}_{lm}''\mathbf{n})\mathbf{n} - 9\frac{a^2}{r^5} R_{ll}\boldsymbol{\sigma}_{lm}'' \right\} + \\ & + \frac{1}{\hbar[\omega_l(1-i0)-\omega-\omega_m^{(+)}]} \times \\ & \times \left. \left\{ \frac{\boldsymbol{\sigma}_{rl}' - 3(\boldsymbol{\sigma}_{rl}'\mathbf{n})\mathbf{n}}{r^3} + 15\frac{a^2}{r^5} R_{2l}(\boldsymbol{\sigma}_{rl}'\mathbf{n})\mathbf{n} - 9\frac{a^2}{r^5} R_{2l}\boldsymbol{\sigma}_{rl}' \right\} \right). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Это поле является электронным поляризующим полем, т.е. оно реализуется благодаря только электронным промежуточным состояниям. Как следует из (4.14), позитронное поляризующее поле для рассматриваемой схемы квантовых переходов отсутствует.

Выделим в (5.15) средние значения спиновых магнитных моментов атома-поляризатора, используя формулу, аналогичную (5.5) в первом порядке теории возмущений.

Для средних значений спиновых переменных в состоянии m введём следующие обозначения:

$$\boldsymbol{\sigma}'_m = (\alpha_\sigma)_m \mathbf{H}', \quad \mathbf{q}'_m = (\alpha_q)_m \mathbf{H}', \quad (5.16)$$

где $\boldsymbol{\sigma}'_m$ — спиновая поляризуемость атома в состоянии m ; $\mathbf{q}'_m$ — среднее значение в состоянии m оператора $\mathbf{q}'$, имеющего матричные элементы $\mathbf{q}'_{lm} = \boldsymbol{\sigma}'_{lm} / \omega_{lm}$, $(\alpha_q)_m$ — соответствующая поляризуемость.

Тогда поляризующее поле (5.15) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)} &= \mu_B \left\{ \alpha_\sigma \frac{\mathbf{h} - 3(\mathbf{h}\mathbf{n})\mathbf{n}}{r^3} - 16\omega_0\alpha_q \frac{a^2}{r^5}(\mathbf{h}\mathbf{n}) + 9\omega_0\alpha_q \frac{a^2}{r^5}\mathbf{h} \right\} [H'] \equiv \\ &\equiv \mathbf{K}_\sigma(\mathbf{a}', \mathbf{a}'') [H'], \end{aligned} \quad (5.17)$$

где μ_B — магнетон Бора, $\mathbf{h}$ — единичный вектор вдоль направления вектора напряжённости магнитного поля $\mathbf{H}'$. Переход к интегральному уравнению распространения фотонов в непрерывной оптической среде осуществляется так же, как это было проделано в разделе 5.1, т.е. с заменой внешнего поля в формуле (5.17) на поле внутри среды. Тогда оператор напряжённости магнитного поля в некоторой точке наблюдения $\mathbf{r}$ в момент времени t внутри или вне среды для спиновых квантовых переходов примет следующий вид [17]:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}_I(\mathbf{r}, t) + \\ &+ \int \frac{N}{V} \mathbf{K}_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') H\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right) dV', \end{aligned} \quad (5.18)$$

где $\mathbf{H}_I(\mathbf{r}, t)$ — оператор напряженности внешнего магнитного поля.

Результаты предыдущего рассмотрения можно разделить на две основные части. Первая часть посвящена решению важной проблемы квантовой электродинамики — проблемы двух взаимодействующих электронов. Вторая часть посвящена применению этого решения к выводу интегральных полевых уравнений в оптике.

Взаимодействие двух атомных электронов, принадлежащих двум неподвижным атомам, находящимся на произвольном расстоянии друг от друга, рассматривается как эффект третьего порядка квантовой электродинамики, где составной частью является обмен виртуальными фотонами с участием различных промежуточных состояний с положительными и отрицательными энергиями. При этом удаётся классифицировать различные схемы квантовых переходов, приводящие к излучению или поглощению одного фотона в системе двух взаимодействующих водородоподобных атомов. Выше была подробно рассмотрена схема квантовых переходов, в которой один из атомов является атомом-поляризатором, а другой — атомом-излучателем (поглощателем).

Обсудим целесообразность перехода к интегральным полевым уравнениям от соответствующих дифференциальных уравнений. Интегральные уравнения для напряжённостей электрического и магнитного полей классической оптики [18] по существу эквивалентны уравнениям Максвелла. Однако на основе интегральных уравнений удастся строгим образом получить формулу Лорентца-Лоренца и теорему погашения, а также решить целый ряд важных опти-

ческих задач. И всё-таки этот мощный метод до сих пор слабо использовался. Объяснением этому может служить то обстоятельство, что известные в классической оптике интегральные уравнения имеют смысл лишь для изотропных немагнитных диэлектрических сред. Поэтому представляет значительный интерес вывод соответствующих интегральных уравнений для более широкого класса задач. Именно этой цели и посвящено приведённое выше рассмотрение, где вначале исследуется проблема двух электронов в рамках квантовой электродинамики. Исследование взаимодействия двух электронов в поле излучения позволяет разделить различные типы квантовых переходов. В частности, как показано выше, можно выделить позитронное поляризующее поле, которое в ряде случаев не является пренебрежимо малым по сравнению с электронным поляризующим полем. Учитывая соответствие уравнения (5.11) и классического интегрального уравнения, можно утверждать, что позитронное поляризующее поле может быть интерпретировано как дополнительный ток в уравнениях Максвелла [19]. Электронное поляризующее поле в электрическом дипольном приближении есть известное в оптике поле диполей, обусловленное только электронными состояниями в спектре взаимодействующих атомов. Позитронное же поляризующее поле возникает за счёт учёта позитронных состояний. При этом речь идет не о реальных позитронных состояниях, а о виртуальных состояниях, возникновение которых происходит без выполнения закона сохранения энергии.

Таким образом, исследование проблемы двух электронов в рамках квантовой электродинамики позволяет не только разработать метод интегральных

уравнений, но и выявить новые механизмы излучения и поглощения реальных фотонов в системе взаимодействующих атомов.

Можно выделить два разных типа взаимодействия атомов с полем излучения. Первый из них соответствует переходу реальных фотонов от возбужденных атомов к невозбужденным. При этом время переноса излучения от одного атома к другому определяется межатомным расстоянием. Такой тип взаимодействия может быть положен в основу вывода соответствующих интегральных уравнений переноса излучения, которые применяются, например, в оптике турбулентных сред [20]. Другой тип взаимодействия основан на введении понятия поляризующих полей, которые рассматриваются выше как эффекты третьего порядка квантовой электродинамики. Как было показано, фотон исчезает в месте расположения одного из взаимодействующих атомов, а поглощение его происходит в месте расположения другого атома. Аналогичная ситуация, очевидно, имеет место и для процесса излучения фотона в системе двух взаимодействующих атомов.

6. Полуклассический метод вывода нелокальных уравнений

Квантовоэлектродинамический метод вывода нелокальных уравнений, изложенный в разделе 5, основан на выделении в поляризующих полях среднего значения индуцированного мультипольного момента атома. Для электрических дипольных переходов электронное поляризующее поле, создаваемое в некоторой точке наблюдения, пропорционально среднему значению индуцированного дипольного момента атома-поляризатора, равного $\alpha \mathbf{E}$, где α —

электронная поляризуемость атома-поляризатора, $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля в месте расположения этого атома. Учитывая это свойство поляризующих полей, можно применять для вывода нелокальных уравнений электродинамики полуклассический метод. В электрическом дипольном приближении, следуя этому методу, в поле электрического диполя [18]

$$\mathbf{E}_1 = \text{rot rot} \frac{[\mathbf{d}_2]}{R_{12}}$$

необходимо дипольный момент $\mathbf{d}_2$ представить как $\alpha \mathbf{E}_2$, где $\mathbf{E}_1$, $\mathbf{E}_2$ — напряженности электрического поля в месте расположения атома-наблюдателя и атома-поляризатора соответственно, R_{12} — расстояние между точечными диполями, символ [...] означает, что соответствующая величина определена в момент времени $t - R_{12}/c$. При этом необходимо иметь в виду, что полуклассический метод следует рассматривать как дополнительный к квантовоэлектродинамическому методу, поскольку только в квантовоэлектродинамическом методе удаётся правильно представить схему квантовых переходов, образующих поляризующие поля. С этой точки зрения поле электрического диполя, известное в классической оптике [18], представляется как поле виртуальных, а не реальных фотонов.

Ниже будут рассмотрены различные нелокальные уравнения для классических переменных полей, выведенные на основе полуклассического метода.

6.1. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в диэлектриках

Уравнение (5.11) для классического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ может быть выведено следующим образом. Запишем функцию Гамильтона системы N неподвижных атомов. Взаимодействие между атомами учтём с помощью запаздывающих потенциалов [4]. Проведём разложение запаздывающих потенциалов по малому параметру (2.4) и ограничимся членами порядка v^2/c^2 в функции Гамильтона, где v — скорость движения атомных электронов. Представим индуцированные дипольные моменты атомов как линейные функции напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ с коэффициентом пропорциональности α , где α — поляризуемость атома. Тогда с учетом только электронных поляризующих полей получим следующее уравнение [18]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \int \text{rot rot} \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}', t - R/c)}{R} dV', \quad (6.1)$$

где $\mathbf{P} = (N/V)\alpha\mathbf{E}$ — вектор поляризации среды, $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $\mathbf{r}$ — точка наблюдения, $\mathbf{r}'$ — некоторая точка внутри среды, либо на её поверхности, $\mathbf{E}_I$ — напряжённость электрического поля внешней волны в точке наблюдения $\mathbf{r}$ в момент времени t .

Уравнение (6.1) записано для непрерывного диэлектрика, состоящего из одинаковых атомов. Следуя выводу уравнения (6.1), можно модифицировать это уравнение, например, для активированных диэлектриков, для дискретно-непрерывных диэлектриков, а также для нелинейных диэлектриков, вводя феноме-

нологически более общее представление вектора поляризации в зависимости от поля $\mathbf{E}$ внутри среды.

Для активированных диэлектриков с непрерывным содержанием резонансных и нерезонансных атомов с поляризуемостями α_R и α_{NR} соответственно имеем следующее интегральное уравнение [21]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \\ & + \int \text{rot rot} \frac{1}{R} \left(\frac{N_R}{V} \right) \alpha_R \mathbf{E} \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ & + \int \text{rot rot} \frac{1}{R} \left(\frac{N_{NR}}{V} \right) \alpha_{NR} \mathbf{E} \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV', \end{aligned} \quad (6.2)$$

где $(N_R/V), (N_{NR}/V)$ — соответствующие концентрации резонансных и нерезонансных атомов.

В дискретно-непрерывном диэлектрике вокруг точки наблюдения учитывается малая область, обнесённая сферой Лорентца, в которой атомы распределены дискретным образом, а за пределами этой области распределение атомов является непрерывным. Как будет показано ниже, роль структурного фактора приводит к эффекту ближнего поля, и для учёта этого эффекта нелокальное уравнение примет вид [22]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \int_{V_1} \text{rot rot} \frac{\alpha}{R} \left(\frac{N}{V} \right) \mathbf{E} \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV', \\ & + \sum_a \text{rot rot} \frac{[\mathbf{d}_a]}{R_a} \end{aligned} \quad (6.3)$$

где V_1 — объём диэлектрика, занятый непрерывно распределёнными атомами; суммирование производится по всем дискретно распределённым атомам внутри сферы Лорентца с индуцированными дипольными моментами $\mathbf{d}_a$, зависящими от запаздывающих

моментов времени $t - R_a/c$, где R_a — расстояние от a -го атома до точки наблюдения в центре сферы Лорентца.

Производить интегрирование просто по пространству, лежащему вне сферы Лорентца, нежелательно [3]. Предполагая, что внутри этой сферы имеется M точек (считая также точку $\mathbf{r}=0$), следует произвести интегрирование за пределами некоторого радиуса ρ , который выбирается следующим образом. Если v_a — объём ячейки, то средняя плотность точек решётки равна $N/V = 1/v_a$; ρ выбирается равным радиусу сферы, содержащей ровно M таких точек. Таким образом, для случая сферы Лорентца целиком расположенной внутри среды, ρ должно определяться из соотношения

$$\frac{4\pi}{3} \frac{N}{V} \rho^3 = M.$$

Для усечённой сферы Лорентца выражение для ρ можно получить после элементарных вычислений, но оно имеет достаточно громоздкий вид и не будет здесь приведено.

Точность вычисления решёточных сумм возрастает с увеличением размеров сферы Лорентца. Представление о величине ошибки можно получить, наблюдая изменение вычисленного значения суммы (в нашем случае — напряжённости электрического поля диполей) при изменении радиуса сферы Лорентца L_0 . Оценки радиуса сферы Лорентца будут выполнены в последующих главах при исследовании конкретных свойств дискретно-непрерывных сред.

Дискретно-непрерывные свойства диэлектрика вблизи поверхности удобно представлять путём разбиения приповерхностного слоя на отдельные слои.

Рассмотрим сверхтонкую диэлектрическую плёнку как систему N монослоев, отделенных друг от друга расстоянием a_0 , где a_0 — постоянная решётки. Окружим точку наблюдения $\mathbf{r} = x, y, z$, которая может находиться внутри или вне плёнки, цилиндром с радиусом основания $\varepsilon \gg a_0$. Ось цилиндра проходит через точку наблюдения параллельно координатной оси z . Атомы внутри цилиндра рассматриваются как диполи с дискретным распределением, а атомы вне цилиндра образуют набор непрерывно распределенных слоёв. Изменение положения точки наблюдения относительно обрамляющих поверхностей плёнки в плоскости x', y' приводит к смещению цилиндра как целого в этой же плоскости. Тогда нелокальное уравнение для напряжённости электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ с частотой ω записывается в виде системы N уравнений [23]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l(x, y) = \mathbf{E}_l(x, y) + \frac{\alpha}{a_0^2} & \\ \sum_{j=1}^N \int_{\sigma}^{\Gamma_{\sigma}} [\text{rot rot } \mathbf{E}_j(x', y') G(R_j)]|_{z=z_l} ds' + & \\ + \alpha \sum_{j=1}^N \sum_a [\text{rot rot } \mathbf{E}_j(x_a, y_a) G(R_{aj})]|_{z=z_l}, & \quad l=1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (6.4)$$

где поля в пределах l -го монослоя имеют вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l(x, y) &= \mathbf{A}_l(x, y, z), \\ \mathbf{E}_l(x, y, z) &= \mathbf{E}(x, y, z_l), \\ \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \end{aligned} \quad (6.5)$$

α — линейная поляризуемость атомов среды,
 $G(R) = \exp(ik_0 R)/R$, $k_0 = \omega/c$,

$$\begin{aligned} R_j &= [(x - x'_j)^2 + (y - y'_j)^2 + (z - z'_j)^2]^{1/2}, \\ R_{aj} &= [(x - x'_a)^2 + (y - y'_a)^2 + (z - z'_j)^2]^{1/2}. \end{aligned}$$

Интегрирование в (6.4) производится по плоскости x', y' за исключением окружности σ с радиусом L_0 и центром в точке (x, y, z_l) . Дифференцирование в (6.4) производится по координатам точки наблюдения (x, y, z_l) .

Пусть на плёнку падает плоская волна под углом θ_l . Тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_{0l} \exp(ik_0 \mathbf{s}_l \mathbf{r}), \\ \mathbf{s}_l &= (-\sin \theta_l, 0, -\cos \theta_l) \end{aligned} \quad (6.6)$$

Благодаря однородности поверхности плёнки решение уравнения (6.4) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l(x, y) &= \mathbf{E}_l(x, y, z) = \\ &= \mathbf{E} \exp(-ik_0 \sin \theta_l x) \end{aligned} \quad (6.7)$$

Сделав соответствующие преобразования в (6.4) и замечая, что $z_l = -a_0(l-1)$, получим вместо (6.4) следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l &= \mathbf{E}_{ll} - i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_l \times \mathbf{E}_j)] \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_l (l-j)] - \\ &- i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=l+1}^N [\mathbf{s}_R \times (\mathbf{s}_R \times \mathbf{E}_j)] \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_l (j-l)] + \\ &+ C \sum_{j=1}^N \hat{\Pi}(a_0(j-l)) \mathbf{E}_j, \end{aligned} \quad (6.8)$$

где $C = \alpha / a_0^3$, тензор $\hat{\Pi}$ определен в приложении,

$$\mathbf{s}_R = (-\sin \theta_l, 0, \cos \theta_l). \quad (6.9)$$

Рассмотрим переход от уравнения (6.8) для дискретно-непрерывной диэлектрической среды к соот-

ветствующему уравнению распространения волн в непрерывной среде. Для этого необходимо положить $a_0 \rightarrow 0$. Тогда уравнение (6.8) примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 E_l(z) = E_{ll} - i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_j \times \mathbf{E}_j)] \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_l (l-j)] - \\
 - i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=l+1}^N [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_j \times \mathbf{E}_j)] \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_l (j-l)] + \\
 + \pi C \frac{a_0}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \mathbf{E}_l.
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Перейдем от суммирования в (6.10) к интегрированию, заменяя $\mathbf{E}_j$ на $\mathbf{E}(z)$. Тогда вместо (6.10) получим уравнение:

$$\begin{aligned}
 \left[1 - \pi C \frac{a_0}{L_0} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \right] \mathbf{E}(z) = \mathbf{A}_l(z) - \\
 - i \frac{2\pi k_0}{\cos \theta_l} \int_{-h}^z [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_l \times \mathbf{P}(z'))] \exp[ik_0 \cos \theta_l (z - z')] dz' - \\
 - i \frac{2\pi k_0}{\cos \theta_l} \int_z^0 [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_l \times \mathbf{P}(z'))] \exp[ik_0 \cos \theta_l (z' - z)] dz',
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

где $\mathbf{P}(z) = C\mathbf{E}(z)$ — вектор поляризации среды на глубине z .

Рассмотрим случай s -поляризации волны в среде. Тогда уравнение (6.11) примет вид:

$$\left[1 - \pi C \frac{a_0}{L_0} \right] E^y(z) = A_l^y(z) + i \frac{2\pi k_0}{\cos \theta_l} \int_{-h}^0 P^y(z') \exp[ik_0 \cos \theta_l (z - z')] dz'.$$

Применим формулу Лорентца-Лоренца:

$$n^2 = \frac{1 + (8\pi/3)C}{1 - (4\pi/3)C}, \tag{6.13}$$

для показателя преломления n среды.

Тогда получим, что

$$1 - nC \frac{a_0}{\varepsilon} = \frac{3}{n^2 + 2}. \quad (6.14)$$

Таким образом, в левой части уравнения (6.12) стоит у-компонента макроскопического поля в среде. В случае нормального падения внешней волны на границу получим из (6.12) следующее уравнение [24-30]:

$$\left[1 - \frac{4\pi}{3}C\right]E^y(z) = A_l^y(z) + i2\pi k_0 \int_{-h}^0 P^y(z') \exp[ik_0(z - z')] dz' \quad (6.15)$$

6.2. Уравнения распространения электромагнитных волн в квадрупольных и магнитодипольных средах

Для учета высших мультипольных моментов в атомах среды необходимо в разложении запаздывающих потенциалов, определяющих функции Лагранжа системы взаимодействующих движущихся зарядов [8], учесть слагаемые, содержащие более высокие степени смещений электронов относительно атомных ядер. Следуя работам [31-33], запишем не-локальные уравнения для микроскопических полей с учетом квадрупольных и магнитодипольных вкладов в оптические свойства среды. Пусть $\mathbf{E}'$ и $\mathbf{H}'$ представляют собой напряженности электрического и магнитного микроскопических полей в некоторой точке наблюдения $\mathbf{r}_l$. Обозначим через $\mathbf{m}(\mathbf{r}_j)$ и $\hat{q}(\mathbf{r}_j)$ соответственно магнитный дипольный момент и тензор квадрупольного момента j -го атома в среде.

Тогда соответствующие уравнения для полей примут следующий вид [33]:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_l) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}_l) + \sum_{j \neq l} [\nabla \times \nabla \times \mathbf{d}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl}) - \nabla \times \nabla \times \nabla \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl}) + ik_0 \nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl})] \quad (6.16)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_l) = \mathbf{H}_I(\mathbf{r}_l) + \sum_{j \neq l} [\nabla \times \nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl}) + ik_0 \nabla \times \nabla \times \nabla \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl}) - ik_0 \nabla \times \mathbf{d}(\mathbf{r}_j) G(R_{jl})] \quad (6.17)$$

где

$$G(R_{jl}) = \frac{\exp(ik_0 R_{jl})}{R_{jl}}, \quad (6.18)$$

$R_{jl} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|$, $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}_l)$, $\mathbf{H}_I(\mathbf{r}_l)$ — напряжённости электрического и магнитного полей внешней волны в точке наблюдения $\mathbf{r}_l$.

Переход к соответствующим интегральным уравнениям распространения электромагнитных волн осуществляется в [33] с помощью величин

$$\hat{\mathbf{Q}} = \frac{N}{V} \hat{\mathbf{q}}, \quad \mathbf{M} = \frac{N}{V} \mathbf{m}, \quad (6.19)$$

где (N/V) — концентрация атомов в оптической среде.

6.3. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в проводящей среде

Рассмотрим проводящую среду как систему взаимодействующих движущихся зарядов с точностью до v^2/c^2 , где v — скорость движения зарядов, c — скорость света в вакууме. В этом рассмотрении можно записать функцию Лагранжа для отдельного заряда в некоторой точке наблюдения $\mathbf{r}$ в момент времени t [4, 8]. При этом скалярный φ_c и векторный $\mathbf{A}_c$ потенциалы поля, образованного движущимися электронами, примут соответственно вид:

$$\begin{aligned}\varphi_c(\mathbf{r}, t) &= \sum_{j=1}^N \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \\ \mathbf{A}_c(\mathbf{r}, t) &= \sum_{j=1}^N \frac{e}{2c} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_j \mathbf{n}_j) \mathbf{n}_j],\end{aligned}\tag{6.20}$$

где $\mathbf{n}_j = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $\mathbf{r}_j$ — радиус-векторы j -х электронов среды, e — заряд электрона, $\mathbf{v}_j$ — скорость движения j -го электрона, N — число электронов в среде. Выражения (6.20) получены с помощью разложения запаздывающих потенциалов по $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$ в предположении, что плотность электронов не успевает заметно измениться за это время [4].

Поле атомных остовов в точке наблюдения $\mathbf{r}$ определим с помощью векторов $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{a}_\alpha + \xi_{\alpha\beta}$, где $\mathbf{a}_\alpha$ — радиус-векторы ядер атомных остовов, $\xi_{\alpha\beta}$ — радиус-векторы электронов относительно своих ядер.

Тогда скалярный φ_v и векторный $\mathbf{A}_v$ потенциалы атомных остатков примут соответственно вид [8]:

$$\begin{aligned}\varphi_v(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\beta=1}^{n_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_A} \frac{e_\beta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta}|}, \\ \mathbf{A}_v(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\beta=1}^{n_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_A} \frac{e_\beta}{2c} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta}|} [\mathbf{v}_{\alpha\beta} + \mathbf{n}_{\alpha\beta} (\mathbf{n}_{\alpha\beta} \mathbf{v}_{\alpha\beta})] + \\ &+ \sum_{\beta=1}^{n_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_A} \frac{e_\beta}{2c} \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta}|^2} [\mathbf{v}_{\alpha\beta} - 3\mathbf{n}_{\alpha\beta} (\mathbf{n}_{\alpha\beta} \mathbf{v}_{\alpha\beta})] - \\ &- \sum_{\beta=1}^{n_\alpha} \sum_{\alpha=1}^{N_A} \frac{e_\beta |\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha|}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta}|^2} \mathbf{n}_{\alpha\beta},\end{aligned}\quad (6.21)$$

где n_α — число электронов в α -м атомном остатке, N_α — число атомных остатков, $\mathbf{n}_{\alpha\beta}$ — единичный вектор, соединяющий точку наблюдения $\mathbf{r}$ и радиус-вектор $\mathbf{r}_{\alpha\beta}$ местоположения β -го электрона в α -м атомном остатке. Выражения (6.21) также получены из запаздывающих потенциалов, однако при этом разложение запаздывающих потенциалов производилось по величине $(\mathbf{a}_\alpha / a_\alpha)(\xi_{\alpha\beta} / c)$ с учётом того, что движение атомных электронов является более быстрым по сравнению с движением электронов, находящихся между атомными остатками.

Подставляя выражения (6.20) и (6.21) в функцию Лагранжа отдельного заряда с точностью до v^2/c^2 , можно получить функцию Лагранжа всей системы зарядов, в которой поле атомных остатков учтено с произвольной мультипольностью. Рассмотрим электрическое дипольное приближение для поля атомных

остатков, раскладывая функции $\left| \mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta} \right|$ и $\left| \mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\beta} \right|^{-1}$ в степенной ряд, ограничиваясь линейными по $\xi_{\alpha\beta}$ членами и учитывая при этом, что $\xi_{\alpha\beta} \ll \left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|$, т.е. что точки наблюдения находятся на значительном удалении от атомных остатков. После ряда преобразований получим скалярный потенциал α -го атома в следующем виде:

$$\varphi_{v\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|} N_\alpha |e| + \frac{\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|} \mathbf{d}_\alpha, \quad (6.22)$$

где N_α — число электронов, отданных α -м атомом, $\mathbf{d}_\alpha = \sum e_\beta \xi_{\alpha\beta}$ — электрический дипольный момент α -го атома.

Преобразуем теперь векторный потенциал $\mathbf{A}_{v\alpha}$ в электрическом дипольном приближении. После ряда преобразований получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{v\alpha} = & \frac{1}{c} \frac{\mathbf{d}_\alpha}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|} - \frac{1}{c} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha)((\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) \mathbf{d}_\alpha)}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|^3} - \\ & - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|^2} N_\alpha |e| - \frac{2(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha)((\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) \mathbf{d}_\alpha)}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|^4} + \frac{\mathbf{d}_\alpha}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|^2}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Применим свойство электрической нейтральности системы зарядов, которое определим как

$$\sum_{\alpha=1}^{N_A} \frac{N_\alpha |e|}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha \right|} - \sum_{j=1}^N \frac{|e|}{\left| \mathbf{r} - \mathbf{r}_j \right|} = 0. \quad (6.23a)$$

Тогда с помощью выражений (6.22) и (6.23), дифференцируя (6.22) по координатам точки наблюдения и полагая, что векторы $\mathbf{a}_\alpha$ от времени не зависят, по-

лучим напряжённость электрического поля α -го атомного остатка:

$$\mathbf{E}_{v\alpha} = \text{rot rot} \frac{[\mathbf{d}_\alpha]}{R_\alpha}, \quad (6.24)$$

где $R_\alpha = |\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha|$ и символ [...] означает, что электрический дипольный момент $\mathbf{d}_\alpha$ определён в запаздывающий момент времени $t - R_\alpha/c$.

Аналогичным образом найдём напряжённость магнитного поля α -го атомного остатка:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{v\alpha} &= \text{rot } \mathbf{A}_{v\alpha} = \\ &= \left\{ \frac{1}{cR_\alpha^3} [\dot{\mathbf{d}}_\alpha] + \frac{1}{c^2 R_\alpha^2} [\ddot{\mathbf{d}}_\alpha] \right\} [\mathbf{u}_\alpha \mathbf{R}_\alpha], \end{aligned} \quad (6.25)$$

где $\mathbf{u}_\alpha$ — единичный вектор вдоль электрического дипольного момента $\mathbf{d}_\alpha$.

Вычислим теперь напряжённости электрического $\mathbf{E}_c(\mathbf{r}, t)$ и магнитного $\mathbf{H}_c(\mathbf{r}, t)$ полей, создаваемых электронами проводимости в точке наблюдения $\mathbf{r}$ в момент времени t , применяя формулы (6.20). Учитывая свойство электронейтральности (6.23а) системы, имеем выражение:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{cj}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{cj} = -\frac{e}{2c^2} [\mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_j \mathbf{n}_j)] \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) - \\ &\quad - \frac{e}{2c^2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \times [\dot{\mathbf{v}}_j + (\dot{\mathbf{v}}_j \mathbf{n}_j) \mathbf{n}_j + (\mathbf{v}_j \dot{\mathbf{n}}_j) \mathbf{n}_j + (\mathbf{v}_j \mathbf{n}_j) \dot{\mathbf{n}}_j] \end{aligned} \quad (6.26)$$

Вычислим производные по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} = -\frac{1}{R_j^2} \dot{\mathbf{R}}_j, \quad \dot{\mathbf{n}}_j = \frac{\mathbf{R}_j}{R_j} - \frac{\mathbf{R}_j \dot{R}_j}{R_j^2},$$

где $R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$. Производная $\dot{\mathbf{R}}_j$ при заданной точке наблюдения есть скорость $\mathbf{v}_j$ j -го заряда. Производная $\dot{\mathbf{R}}_j$ может быть вычислена дифференцированием тождества $R_j^2 = \mathbf{R}_j^2$. Тогда получим следующее выражение из (6.26):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{cj}(\mathbf{r}, t) = & -3 \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R_j^2} \mathbf{n}_j (\mathbf{n}_j \mathbf{v}_j)^2 - \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R_j} \dot{\mathbf{v}}_j - \\ & - \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R_j} (\dot{\mathbf{v}}_j \mathbf{n}_j) \mathbf{n}_j + \frac{e}{2c^2} \frac{\mathbf{v}_j^2}{R_j^2} \mathbf{n}_j. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Напряженность магнитного поля в точке наблюдения $\mathbf{r}$, согласно выражению (6.20), примет вид:

$$\mathbf{H}_{cj} = \text{rot } \mathbf{A}_{cj} = \frac{e}{c} \frac{1}{R_j^2} [\mathbf{v}_j \times \mathbf{n}_j]. \quad (6.28)$$

Переход от формул (6.25), (6.24), (6.27), (6.28) к интегральным уравнениям распространения электромагнитных волн в проводящей среде осуществим, используя свойства непрерывности и самосогласованности внутренних полей. Тогда с учётом этих свойств оптической среды получим следующее уравнение для напряжённости электрического поля [34]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \int \text{rot rot} \frac{\mathbf{P}_A(\mathbf{r}', t - R/c)}{R} dV' + \\ + \int \mathbf{L}_E(\mathbf{r}', t - R/c) dV' \end{aligned}, \quad (6.29)$$

где $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — напряжённость электрического поля внешней волны,

$$\mathbf{L}_E = \frac{N}{V} \left\{ -\frac{3e}{2c^2} \frac{1}{R^2} (\mathbf{v}\mathbf{n})^2 \mathbf{n} - \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R} \dot{\mathbf{v}} - \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R} (\dot{\mathbf{v}}\mathbf{n})\mathbf{n} + \frac{e}{2c^2} \frac{1}{R^2} \mathbf{v}^2 \mathbf{n} \right\}, \quad (6.29a)$$

$\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ — единичный вектор, соединяющий точку наблюдения $\mathbf{r}$ и некоторую точку $\mathbf{r}'$ внутри среды.

Аналогичным образом получим интегральное уравнение для напряжённости магнитного поля [34]:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = & \mathbf{H}_I(\mathbf{r}, t) + \\ & + \frac{1}{c} \int \text{rot} \frac{\mathbf{P}_A(\mathbf{r}', t - R/c)}{R} dV' + \frac{e}{c} \frac{N}{V} \int \frac{1}{R^2} [\mathbf{v} \times \mathbf{n}] dV', \end{aligned} \quad (6.30)$$

где $\mathbf{H}_I$ — напряжённость магнитного поля внешней волны.

Если точка наблюдения $\mathbf{r}$ находится вне оптической среды, то интегралы в (6.29), (6.30) берутся по всей среде. Если она расположена внутри среды, то необходимо вначале исключить небольшую область, ограниченную сферой σ_0 малого радиуса a , чтобы устранить расходимость при $R \rightarrow 0$.

Уравнения (6.29) и (6.30) являются интегродифференциальными уравнениями для микроскопических полей. Решая эти уравнения, можно определить микроскопическое поле в различных точках наблюдения внутри и вне среды, определив зависимости векторов $\mathbf{P}_A$ и $\mathbf{v}$ от поля с помощью соответствующих материальных уравнений.

В работе [34] уравнение (6.29) было применено для объяснения существенных различий в теоретических и экспериментальных зависимостях оптических постоянных серебра в широком диапазоне длин волн

[18]. Для этого предполагалось, что векторы $\mathbf{P}_A$ и $\mathbf{v}$ в (6.29) являются линейными функциями поля $\mathbf{E}$, и отбрасывались нелинейные слагаемые в функции (6.29a). Атомные остатки рассматривались как двухуровневые квантовомеханические системы с силой осциллятора f и временем жизни Γ^{-1} , а электроны проводимости рассматривались в рамках модели классических электронов с поляризуемостью α_c и показателем затухания β . В работе [34] была выведена формула для комплексного показателя преломления металла, доказана обобщенная теорема погашения Эвальда-Озеена для металла, получены формулы для амплитуд преломленной и отраженной волн. При этом были определены значения f и Γ^{-1} , а также β по формуле $\beta = 4\pi\omega_p^2\rho$, где ω_p — плазменная частота, ρ — электросопротивление.

Итак, с помощью квантовоэлектродинамического и полуклассического методов выведены уравнения (5.11), (5.18) для квантованных полей и с учетом спинных и орбитальных степеней свободы взаимодействующих атомов, а также уравнения (6.1)-(6.4), (6.15), (6.19), (6.18), (6.29), (6.30) для классических полей. Эти уравнения являются нелокальными уравнениями в пространстве и во времени, поскольку поле в некоторой точке наблюдения связано с поведением зарядов в других точках среды. Ниже будут представлены решения ряда типовых задач классической и нелинейной оптики, в которых свойство нелокальности уравнений электродинамики имеет принципиальное значение. Будет показано, что эти полевые уравнения позволяют описать оптические явления в различных наноструктурных системах.

Приложение А

Тензор $\hat{\Pi}$, фигурирующий в формулах (6.8), (4.2.5), определяется следующими выражениями:

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}(z) &= (z_{j-1} - z_j)[\hat{L}(z) + \hat{T}(z)] + \hat{S}(z), \quad z \neq 0, \\ \hat{\Pi}(0) &= (z_{j-1} - z_j)\hat{J} + \hat{S}(0), \quad z = 0.\end{aligned}$$

Симметричный тензор третьего ранга $\hat{L}(z)$ имеет следующие компоненты:

$$\begin{aligned}\hat{L}_{xy}(z) &= \hat{L}_{zy}(z) = 0, \\ \hat{L}_{xx}(z) &= -2\pi \exp(ik_0 L_0)(L_0^2 - z^2) \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} \frac{J_1(\xi)}{\xi}, \\ \hat{L}_{yy}(z) &= 2\pi \exp(ik_0 L_0) \left\{ \frac{\xi J_1(\xi)}{L_0} - (L_0^2 - z^2) \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} \left[J_0(\xi) - \frac{J_1(\xi)}{\xi} \right] \right\}, \\ \hat{L}_{zz}(z) &= \hat{L}_{xx}(z) + \hat{L}_{yy}(z), \\ \hat{L}_{zx}(z) &= 2\pi \exp(ik_0 L_0) iz \sqrt{L_0^2 - z^2} \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} J_1(\xi),\end{aligned}$$

где $\xi = k_0 \sqrt{L_0^2 - z^2} \sin \Theta_I$, J_n — функция Бесселя n -го порядка.

$\hat{T}(z)$ — симметричный тензор третьего ранга. Его компоненты:

$$\hat{T}_{xy}(z) = \hat{T}_{zy}(z) = 0,$$

$$\hat{T}_{xx}(z) = 2\pi \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} J_0(k_0 \rho \sin \Theta_I) G(R) \left[\left(\frac{z}{R} \right)^2 \left(-k_0^2 - i \frac{3k_0}{R} + \frac{3}{R^2} \right) + \left(ik_0 - \frac{1}{R} \right) \right] \rho d\rho,$$

$$\hat{T}_{zz}(z) = -2\pi k_0^2 \sin^2 \Theta_I \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} J_0(k_0 \rho \sin \Theta_I) G(R) \rho d\rho,$$

$$\hat{T}_{yy}(z) = \hat{T}_{xx}(z) + \hat{T}_{zz}(z),$$

$$\hat{T}_{zx}(z) = 2\pi i k_0 z \sin \Theta_I \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} J_0(k_0 \rho \sin \Theta_I) G(R) \left(ik_0 - \frac{1}{R} \right) \frac{\rho}{R} d\rho,$$

где $R = \sqrt{\rho^2 + z^2}$.

$\hat{S}$ — симметричный тензор с компонентами:

$$\hat{S} = \frac{1}{N} \sum_{a_j} \frac{\alpha_{kl}}{\langle \alpha \rangle} G(R_{a_j}) \exp[-ik_{Ix}(x - x_{a_j})] \times \\ \times \left[k_0^2 (\delta_{kl} - n_{a_jk} n_{a_jl}) - ik_0 \frac{3n_{a_jk} n_{a_jl} - \delta_{kl}}{R_{a_j}} + \frac{3n_{a_jk} n_{a_jl} - \delta_{kl}}{R_{a_j}^2} \right],$$

$$R_{a_j} = \sqrt{(x - x_{a_j})^2 + (y - y_{a_j})^2 + z^2},$$

δ_{kl} — символ Кронекера. Суммирование распространяется на атомы j -го слоя, лежащие в пределах окружности радиуса $\sqrt{L_0^2 - z^2}$.

$\hat{J}$ — диагональный тензор с компонентами:

$$\begin{aligned}
J_{xx} &= 2\pi \frac{\exp(ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2})}{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \left[J_0(\xi) + \frac{J_1(\xi)}{\xi} + (ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2} - 1) \right] + \\
&\quad + 2\pi k_0 \sin^2 \Theta_I \left[k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) \frac{J_1(a)}{a} d\rho - \frac{i}{1 + \cos \Theta_I} \right], \\
J_{yy} &= 2\pi \frac{\exp(ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2})}{\sqrt{L_0^2 - z^2}} (1 - ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2}) \frac{J_1(\xi)}{\xi} + \\
&\quad + 2\pi k_0 \left[\frac{i}{\cos \Theta_I} - k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) J_1(a) d\rho \right], \\
J_{zz} &= -2\pi \frac{\exp(ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2})}{\sqrt{L_0^2 - z^2}} J_0(\xi) + \\
&\quad + 2\pi k_0 \left[\frac{i}{\cos \Theta_I} - k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) J_1(a) d\rho \right] - \\
&\quad - 2\pi k_0 \sin^2 \Theta_I \left[k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) \frac{J_1(a)}{a} d\rho - \frac{i}{1 + \cos \Theta_I} \right],
\end{aligned}$$

где $\xi = k_0 \sqrt{L_0^2 - z^2} \sin \Theta_I$, $a = k_0 \rho \sin \Theta_I$.

Приложение В. Полевые уравнения микроскопической электродинамики

Формулы, представленные в этом приложении, необходимы при проведении конкретных численных расчётов сигналов дипольного излучения различных структур, включая оптические наноструктурные объекты из атомов, молекул, наночастиц и т.д.

- Уравнения Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (\text{B.1})$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho, \quad (\text{B.3})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Материальные уравнения $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$,
где σ — удельная проводимость, ε — диэлектрическая проницаемость, μ — магнитная проницаемость.

- Вектор Умова–Пойнтинга

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}]$$

- Уравнения волнового движения в однородной среде

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{\varepsilon \mu}{c^2} \ddot{\mathbf{E}} = 0, \quad \Delta \mathbf{H} - \frac{\varepsilon \mu}{c^2} \ddot{\mathbf{H}} = 0,$$

$$v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon \mu}} \text{ — скорость распространения электромагнитных волн.}$$

- Электромагнитная плоская волна гармоническая

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)},$$

$\mathbf{k}$ — волновой вектор, ω — частота,

$$\mathbf{E} = -\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} [\mathbf{s} \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} [\mathbf{s} \times \mathbf{E}],$$

$\mathbf{s}$ — единичный вектор вдоль направления распространения электромагнитной волны.

- Среднее значение вектора Пойтинга
($T' \gg T = 2\pi/\omega$)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)\} = \frac{1}{2}[\mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}],$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{H}_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t}\} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{H}_0^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}],$$

где $\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0$ — комплексные функции координат.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S} \rangle &= \frac{1}{2T'} \int_{-T'}^{T'} \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] dt = \\ &= \frac{c}{4\pi} \frac{1}{2T'} \int_{-T'}^{T'} \frac{1}{4} \{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0] e^{-2i\omega t} + [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0^*] + [\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{H}_0] + [\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{H}_0^*] e^{2i\omega t} \} dt = \\ &= \frac{c}{16\pi} \{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0^*] + [\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{H}_0] \} = \frac{c}{8\pi} \text{Re}[\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0^*]. \end{aligned}$$

Поскольку

$$\frac{1}{2T'} \int_{-T'}^{T'} e^{-2i\omega t} dt = \frac{1}{4\pi} \frac{T}{T'} \sin 2\omega T' \rightarrow 0.$$

- Дифракция на проводящей сфере (рис. 2)

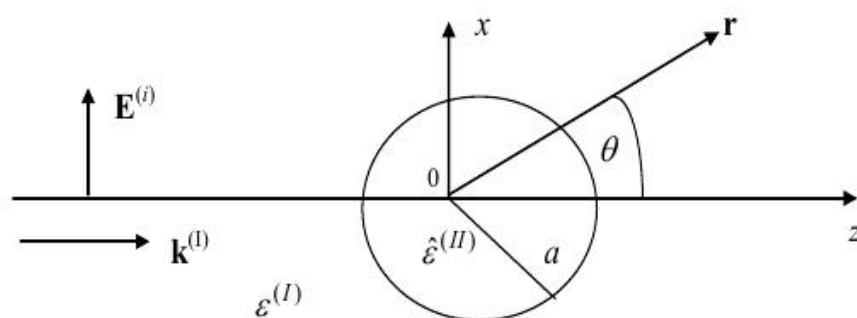


Рис. 2. К рассмотрению дифракции на проводящей сфере.

$\mathbf{E}^{(I)}$ — электрический вектор внешней волны, $\epsilon^{(I)}$, $\epsilon^{(II)}$ — диэлектрические проницаемости внешней среды и проводящей сферы, соответственно.

Поле в любой точке наблюдения $\mathbf{r}$ вне сферы имеет вид:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{(i)} + \mathbf{E}^{(s)}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}^{(i)} + \mathbf{H}^{(s)}, \quad (\text{B.5})$$

где $\mathbf{E}^{(s)}$, $\mathbf{H}^{(s)}$ — электрический и магнитный векторы рассеянной волны. Множитель $\exp(-i\omega t)$ опущен.

Усреднённый по времени поток энергии имеет вид:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle + \langle \mathbf{S}^{(s)} \rangle + \langle \mathbf{S}' \rangle, \quad (\text{B.6})$$

где

$$\langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\langle \mathbf{E}^{(i)} \times (\mathbf{H}^{(i)})^* \right\rangle, \quad (\text{B.7})$$

$$\langle \mathbf{S}^{(s)} \rangle = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\langle \mathbf{E}^{(s)} \times (\mathbf{H}^{(s)})^* \right\rangle, \quad (\text{B.8})$$

$$\langle \mathbf{S}' \rangle = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\langle \mathbf{E}^{(i)} \times (\mathbf{H}^{(s)})^* + \mathbf{E}^{(s)} \times (\mathbf{H}^{(i)})^* \right\rangle. \quad (\text{B.9})$$

Рассмотрим усреднённый поток энергии, выходящей через сферическую поверхность большого радиуса R .

Пусть $W^{(i)}$, $W^{(s)}$, W' — интегралы от радиальных компонент $\langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle_r$, $\langle \mathbf{S}^{(s)} \rangle_r$, $\langle \mathbf{S}' \rangle_r$, взятые по поверхности сферы радиуса R , а $W^{(a)}$ — скорость поглощения энергии сферическим телом. Тогда

$$-W^{(a)} = W^{(i)} + W^{(s)} + W'. \quad (\text{B.10})$$

Для непроводящей сферы 1, окружающей тело, имеем $W^{(i)} = 0$, поэтому

$$W^{(a)} + W^{(s)} = -W' = -\frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} \iint_S \left(\mathbf{E}^{(i)} \times (\mathbf{H}^{(s)})^* + \mathbf{E}^{(s)} \times (\mathbf{H}^{(i)})^* \right) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (\text{B.11})$$

где S — поверхность сферы радиуса R , $\mathbf{n}$ — единичный вектор внешней нормали.

Внешняя волна

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(i)} &= \mathbf{e} \exp(ik^{(I)}(\mathbf{n}_0 \mathbf{r})), \\ \mathbf{H}^{(i)} &= \mathbf{h} \exp(ik^{(I)}(\mathbf{n}_0 \mathbf{r})). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Предположим, что $\mathbf{e}$ и $\mathbf{h}$ — вещественные постоянные векторы.

Рассеянная волна

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(s)} &= \mathbf{a}(\mathbf{n}) \frac{\exp(ik^{(I)}r)}{r}, \\ \mathbf{H}^{(s)} &= \mathbf{b}(\mathbf{n}) \frac{\exp(ik^{(I)}r)}{r}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

С помощью уравнений Максвелла получим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{h} &= \sqrt{\varepsilon^{(I)}} [\mathbf{n}_0 \times \mathbf{e}], \quad \mathbf{b} = \sqrt{\varepsilon^{(I)}} [\mathbf{n} \times \mathbf{a}], \\ (\mathbf{n}_0 \mathbf{e}) &= (\mathbf{n}_0 \mathbf{h}) = 0, \\ (\mathbf{n} \mathbf{a}) &= (\mathbf{n} \mathbf{b}) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

где учтено, что внешняя среда 1 является немагнитной ($\mu^{(I)} = 1$).

Из соотношений (B.14) следует, что на поверхности сферы S

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{E}^{(i)} \times (\mathbf{H}^{(s)})^* \right] \cdot \mathbf{n} &= \sqrt{\varepsilon^{(I)}} \mathbf{e} \mathbf{a} \exp[ik^{(I)} R(\mathbf{n}_0 \mathbf{n})] \frac{\exp(ik^{(I)} R)}{R} \\ \left[\mathbf{E}^{(s)} \times (\mathbf{H}^{(i)})^* \right] \cdot \mathbf{n} &= \\ &= \sqrt{\varepsilon^{(I)}} [(\mathbf{n} \mathbf{n}_0)(\mathbf{a} \mathbf{e}) - (\mathbf{n} \mathbf{e})(\mathbf{n}_0 \mathbf{a})] \exp(-ik^{(I)} R(\mathbf{n}_0 \mathbf{n})) \frac{\exp(ik^{(I)} R)}{R}. \end{aligned}$$

Подставим эти выражения в (B.11). Для вычисления полученного интеграла воспользуемся леммой

$$\frac{1}{R} \iint_S f(\mathbf{n}) \exp[-ik^{(I)} R(\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{n})] dS = \frac{2i\pi}{k^{(I)}} [f(\mathbf{n}_0) \exp(-ik^{(I)} R) - f(-\mathbf{n}_0) \exp(ik^{(I)} R)].$$

Тогда получим важное соотношение:

$$W^{(s)} + W^{(a)} = \frac{c\sqrt{\varepsilon^{(I)}}}{2k^{(I)}} \text{Im}[\mathbf{e} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{n}_0)], \quad (\text{B.15})$$

то есть в случае падения линейно поляризованной электромагнитной волны скорость диссипации энергии пропорциональна проекции на направление электрического вектора падающей волны амплитуды волны, рассеянной в первоначальном направлении ($\mathbf{n} = \mathbf{n}_0$).

Сечение экстинкции тела

$$Q = \frac{W^{(s)} + W^{(a)}}{\langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle} = 2\lambda^{(I)} \text{Im} \left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{n}_0)}{\mathbf{e}^2} \right), \quad (\text{B.16})$$

где $\langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle = \frac{c\sqrt{\varepsilon^{(I)}} \mathbf{e}^2}{8\pi}$ — количество энергии, падающей на единичную площадь в сечении тела.

Сечения рассеяния $Q^{(s)}$ и поглощения $Q^{(a)}$

$$Q^{(s)} = \frac{W^{(s)}}{\left| \langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle \right|}, \quad Q^{(a)} = \frac{W^{(a)}}{\left| \langle \mathbf{S}^{(i)} \rangle \right|}. \quad (\text{B.17})$$

Очевидно, что $Q = Q^{(s)} + Q^{(a)}$. Для непоглощающего тела $Q^{(a)} = 0$ и сечение экстинкции совпадает с сечением рассеяния.

Приложение С. Поле электрического диполя

- Поле точечного электрического диполя

$$\mathbf{E} = \text{rot} \text{rot} \frac{d(t - R/c)}{R} \mathbf{n}, \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{c} \text{rot} \frac{\dot{P}(t - R/c)}{R} \mathbf{n}, \quad (\text{C.2})$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор, определяющий ориентацию электрического дипольного момента, находящегося в начале системы координат.

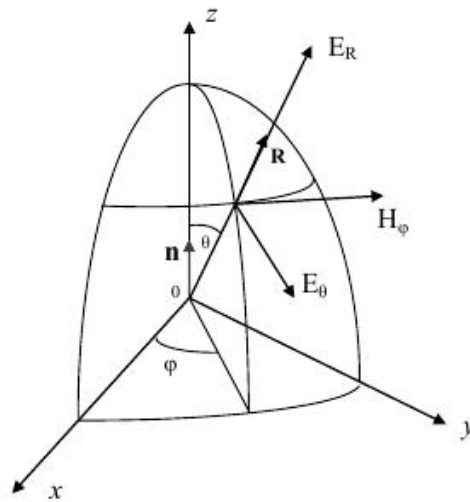


Рис. 3. Расчёт поля электрического диполя с дипольным моментом вдоль оси z .

$$\mathbf{E} = \left\{ \frac{3[d]}{R^5} + \frac{3[\dot{d}]}{cR^4} + \frac{[\ddot{d}]}{c^2R^3} \right\} (\mathbf{nR})\mathbf{R} - \left\{ \frac{[d]}{R} + \frac{[\dot{d}]}{cR^2} + \frac{[\ddot{d}]}{c^2R} \right\} \mathbf{n}, \quad (\text{C.3})$$

$$\mathbf{H} = \left\{ \frac{[\dot{d}]}{cR^3} + \frac{[\ddot{d}]}{c^2R^2} \right\} (\mathbf{n} \times \mathbf{R}), \quad (\text{C.4})$$

где символ [...] означает, что функция определена в запаздывающие моменты времени $t - \frac{R}{c}$.

- Запаздывающее и кулоновское поля

Слагаемые в (C.3), пропорциональные $\frac{1}{R^3}$, соот-

ветствуют кулоновскому полю электрического диполя, остальные — запаздывающему.

- Поле диполя в волновой зоне

В сферической системе координат (рис. 3), обозначая через $\mathbf{i}_R$, $\mathbf{i}_\theta$, $\mathbf{i}_\varphi$ единичные векторы в направлениях увеличения R , θ , φ , получим

$$\mathbf{R} = R\mathbf{i}_R, \quad \mathbf{n} = \mathbf{i}_R \cos \theta - \mathbf{i}_\theta \sin \theta,$$

$$(\mathbf{nR}) = R \cos \theta,$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{R} = (R \sin \theta) \mathbf{i}_\varphi.$$

Тогда

$$\mathbf{E} = E_R \mathbf{i}_R + E_\theta \mathbf{i}_\theta, \quad \mathbf{H} = H_\varphi \mathbf{i}_\varphi,$$

где

$$E_R = 2 \left(\frac{[d]}{R^3} + \frac{[\dot{d}]}{cR^2} \right) \cos \theta, \\ E_\theta = \left(\frac{[d]}{R^3} + \frac{[\dot{d}]}{cR^2} + \frac{[\ddot{d}]}{c^2R} \right) \sin \theta, \quad (\text{C.5})$$

$$H_{\varphi} = \left(\frac{[\dot{d}]}{cR^2} + \frac{[\ddot{d}]}{c^2R} \right) \sin \theta.$$

В волновой зоне

$$E_{\theta} \approx H_{\varphi} \approx \frac{[\ddot{d}]}{c^2R} \sin \theta, \quad (C.6)$$

а другие компоненты пренебрежимо малы.

• Интенсивность дипольного излучения точечного диполя

Рассчитаем количество энергии, излучаемой в 1 секунду через сферическую волновую поверхность радиуса R в волновой зоне. Вектор Пойтинга

$$S = \frac{c}{4\pi} |E_{\theta} H_{\varphi}| = \frac{[\ddot{d}]^2}{4c^3 \pi R^2} \sin^2 \theta. \quad (C.7)$$

Общее количество энергии, протекающее через сферическую поверхность в 1 секунду, равно

$$\int S d\sigma = \frac{[\ddot{d}]^2}{4c^3 R^2 \pi} \int_0^{\pi} \sin^2 \theta \cdot 2\pi R^2 \sin \theta d\theta = \frac{2}{3c^3} [\ddot{d}]^2. \quad (C.8)$$

Для периодической функции

$$d(t) = d_0 e^{-i\omega t},$$

где d_0 — комплексная величина, имеем в волновой

зоне ($R \gg \frac{\lambda}{2\pi}$)

$$E_{\theta} = H_{\varphi} = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 d_0 \sin \theta \frac{\exp\left\{-i\omega\left(t - \frac{R}{c}\right)\right\}}{R}. \quad (C.9)$$

Тогда количество энергии, проходящей через единичную площадь сферической поверхности в 1 с в волновой зоне равно

$$S = \frac{c}{4\pi} \left(\frac{\omega}{c} \right)^4 \frac{[\mathbf{d}_0]^2}{R^2} \sin^2 \theta \cos^2 \left[\omega \left(t - \frac{R}{c} \right) - \alpha \right], \quad (\text{C.10})$$

где α — фаза $\mathbf{d}_0$. Усредняя по времени получим

$$\langle S \rangle = \frac{[\mathbf{d}_0]^2}{8\pi R^2} \frac{\omega^4}{c^3} \sin^2 \theta. \quad (\text{C.11})$$

Поэтому энергия, усреднённая по времени, проходящая в 1 секунду через всю поверхность, равна

$$\int \langle S \rangle d\sigma = \frac{1}{3} \frac{[\mathbf{d}_0]^2}{c^3} \omega^4. \quad (\text{C.12})$$

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963).
2. Давыдов А. С. *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963).
3. Борн М, Хуан Кунь. *Динамическая теория кристаллических решёток* (М.: ИЛ, 1958).
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Теория поля* (М.: Физматгиз, 1960).
5. Darwin C. G. Trans. Cambr. Philos. Soc. **23** 137 (1924).
6. Гадомский О. Н., Нагибаров В. Р., Соловаров Н. К. ЖЭТФ **63** 813 (1973).
7. Гадомский О. Н., Нагибаров В. Р., Соловаров Н. К. ЖЭТФ **70** 435 (1976).
8. Гадомский О. Н., Власов Р. А. *Оптическая эхоспектроскопия поверхности* (Минск: Навука и тэхніка, 1990).
9. Landau L. D. Phys. Z. Sowjetunion **8** 487 (1935).
10. Bethe H., Fermi E. Z. Phys. **77** 296 (1932).
11. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. *Квантовая электродинамика* (М.: Физматгиз, 1959).
12. Kreit G. Phys. Rev. **34** 553 (1929).
13. Chang C. S., Stehle P. Phys. Rev. A **4** 630 (1971).
14. Федюшин Б. К. ЖЭТФ **22** 140 (1952).
15. Лифшиц Е. М. ЖЭТФ **18** 562 (1948).
16. Drake G.W.F. Phys. Rev. A **5** 1979 (1972).
17. Гадомский О. Н., Алтуний К. К. ЖЭТФ **114** 1555 (1998).
18. Борн М., Вольф Э. *Основы оптики* (М.: Наука, 1973). с. 106.
19. Gadomsky O. N., Krutitsky K. V. J. European Opt. Soc. B **9** 343 (1997).

20. Исимару А. *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах* (М.: Мир, 1981).
21. Гадомский О. Н., Гадомская И. В., Моисеев С. Г. Изв. РАН. Сер. физ. **62** 293 (1998).
22. Gadomsky O. N., Krutitsky K. V. J. Opt. Soc. Am. B **13** 1679 (1996).
23. Krutitsky K. V., Suhov S. V. J. Phys. B **30** 5341 (1997).
24. Аллен Л., Эберли Дж. *Оптический резонанс и двухуровневые атомы* (М.: Мир, 1978).
25. Bowden C. M., Dowling J. P. Phys. Rev. A **47** 1247 (1993).
26. Bowden C. M., Dowling J. P. Phys. Rev. A **49** 1514 (1994).
27. Benedict M. G., Malyshev V. A., Trifonov E. D., Zaitsev A. I. Phys. Rev. A **43** 3845 (1991).
28. Jarque E. C., Malyshev V. A., Roso L.J. Mod. Opt. **44** 563 (1997).
29. Malyshev V. A., Jarque E. C. J. Opt. Soc. Am. B **14** 1167 (1997).
30. Малышев В. А., Конехеро Харке Э. Опт. и спектр. **82** 630 (1997).
31. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. A **49** 1313 (1994).
32. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. A **50** 714 (1994).
33. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. E **56** 6123 (1997).
34. Гадомский О. Н., Воронов Ю. Ю. Опт. и спектр. **87** 1017 (1999).
35. Malyshev V., Moreno P. Phys. Rev. A **53** 416 (1996).

36. Гадамский О. Н., Абрамов Ю. В. Опт. и спектр. **93** 953 (2002).
37. Гадамский О. Н., Крутицкий К. В. ЖПС **63** 278 (1996).
38. Gadomsky O. N., Krutitsky K. V. Proc. SPIE **2799** 77 (1996).
39. Гадамский О. Н., Крутицкий К. В. ЖЭТФ **106** 936 (1994).