

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики

О.Н. Гадомский

Обзор посвящен современным представлениям о нелокальных уравнениях электродинамики, которые могут быть применены вместо уравнений Максвелла, например при решении различных граничных задач оптики. Вывод нелокальных уравнений производится на основе полуклассического и квантово-электродинамического подходов. Полуклассический подход основан на разложении запаздывающих потенциалов по соответствующим параметрам и последующем переходе в функции Лагранжа системы движущихся зарядов с точностью до v^2/c^2 к квантовомеханическим операторам. Квантово-электродинамический подход основан на рассмотрении эффектов 2-го и 3-го порядков квантовой электродинамики для двух водородоподобных атомов на произвольном расстоянии друг от друга. С учетом различных типов квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов, а также типов промежуточных состояний получены различные нелокальные уравнения распространения фотонов и электромагнитных волн в спиновых системах, в диэлектриках и в металлах. В сочетании с соответствующими материальными уравнениями нелокальные полевые уравнения применены для решения ряда типовых граничных задач оптики в полу бесконечных средах, в сверхтонких пленках и в малых объектах, линейные размеры которых значительно меньше длины световой волны.

PACS numbers: 03.50.Kk, 78.66.-w

Содержание

1. Введение (1145).
2. Матрица эффективной энергии взаимодействия двух водородоподобных атомов, находящихся на произвольном расстоянии друг от друга (1147).
3. Переход к двухкомпонентным волновым функциям (1149).
4. Роль внешнего поля во взаимодействии двух атомных электронов (1151).
 - 4.1. Учет промежуточных состояний с отрицательной энергией.
 - 4.2. Промежуточные состояния с положительными энергиями.
5. Поляризующие поля в системе водородоподобных атомов, излучающих или поглощающих фотоны (1152).
 - 5.1. Интегральные уравнения распространения фотонов в электродипольной оптической среде.
 - 5.2. Интегральное уравнение распространения фотонов в системе электронных спинов.
6. Полуклассический метод вывода нелокальных уравнений (1156).
 - 6.1. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в диэлектриках.
 - 6.2. Уравнения распространения электромагнитных волн в квадрупольных и магнитодипольных средах.
 - 6.3. Интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в проводящей среде.
7. Спонтанное излучение атома вблизи границы раздела вакуум–диэлектрик и эффект ближнего поля (1160).
8. Связь микроскопического и макроскопического полей в дискретно-непрерывном диэлектрике внутри диэлектрика и на его поверхности (1162).
9. Микроскопическая теория переходного слоя на идеальной поверхности полу бесконечных диэлектрических сред и эффект ближнего поля (1164).
 - 9.1. Переходный слой на поверхности дискретно-непрерывного диэлектрика.
 - 9.2. Показатель преломления дискретно-непрерывного диэлектрика вдали от границы.
 - 9.3. Поле отраженной волны в волновой зоне.
10. Оптическое зондирование электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды (1168).
11. Оптика малых объектов и эффект ближнего поля (1171).
 - 11.1. Два атома в поле слабой квазирезонансной плоской волны.
 - 11.2. Два атома в поле интенсивной квазирезонансной плоской волны.
 - 11.3. Оптическая запись квантовой информации в двухкубитовом квантовом компьютере.
 - 11.4. Оптическая голограмма малых объектов.
12. Заключение (1176).
13. Приложения (1177).
- Список литературы (1178).

1. Введение

Закон Кулона e^2/r определяет энергию взаимодействия двух электронов, находящихся на расстоянии r друг от друга, которое должно быть меньше некоторого характерного пространственного масштаба, когда скорости

О.Н. Гадомский. Ульяновский государственный университет,
432700 Ульяновск, ул. Л. Толстого 42, Российской Федерации
Тел. (8422) 32-15-98
E-mail: qed_group@mail.ru

Статья поступила 5 июня 2000 г.

движения v зарядов 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 возбужденном, 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 пролета фотона t_p расстояния r ($t_p = r/c$).

При описании взаимодействия атомов, находящихся на расстояниях $r > \lambda_0$, применения закона Кулона оказывается недостаточно. 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 . Учет 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 счет 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

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

где \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_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 учетом 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 2-го порядка квантовой электродинамики, включающих виртуальный обмен фотонами всех поляризаций, и был выведен следующий оператор:

$$U^{(2)} = e^2 \exp \left(\frac{i\omega_0 a}{c} \right) \left\{ \frac{1}{r} + \frac{a(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{r^2} - \frac{(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) + (\mathbf{a}_1 \mathbf{n})(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{2r} - \frac{a^2}{2} \frac{(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) - 3(\mathbf{a}_1 \mathbf{n})(\mathbf{a}_2 \mathbf{n})}{r^3} \right\}, \quad (1.2)$$

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 далеких 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 учетом 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 квантовой 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 этом обзоре будут представлены различные нелокальные уравнения с подробным обсуждением их физического смысла. Учитывая сложность уравнений Максвелла и локальность, не всегда удается на их основе найти соответствующее решение. В этом обзоре 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 ее поверхности; при выводе формул для амплитуд оптических полей в различных точках наблюдения внутри и вне оптических сред; при решении проблем 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 данном обзоре будет соблюдаться следующая схема изложения. Вначале будут рассмотрены эффекты 3-го 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 переменных квантованных и классических полей. И, наконец, в данном обзоре будут приведены решения ряда задач оптики, которые демонстрируют преимущества нелокальных уравнений по сравнению с уравнениями Максвелла.

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.

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}'''|} \times \right. \\ & \times \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}]|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}') \Psi_l(\mathbf{r}') \times \\ & \times \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \gamma_{\mu}^{(+)} \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}^{'''} \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''|} \times \\ & \times \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) - \omega - \omega_m^{(+)}} \times \\ & \times \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}^{(+)} \Psi_l(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}^{'''} \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \\ & - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_p^{(+)}} \times \\ & \times \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}^{(+)} \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_l(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}^{'''} \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') - \\ & - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) - \omega - \omega_n^{(+)}} \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}'^{(+)} \times \\ & \times \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_p(\mathbf{r}'') \gamma_{\mu}'' \Psi_l(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}''') \hat{A}(\mathbf{r}''') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \\ & + \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_r^{(+)} - \omega_n^{(+)}]|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 + i0) + \omega - \omega_p^{(+)}} \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}') \times \\ & \times \Psi_l(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \gamma_{\mu}'' \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}''' \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \\ & + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_n^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) - \omega - \omega_m^{(+)}} \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}'^{(+)} \Psi_l(\mathbf{r}') \times \\ & \times \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}''' \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \\ & + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_p^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''']\}}{\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}'^{(+)} \times \end{aligned}$$

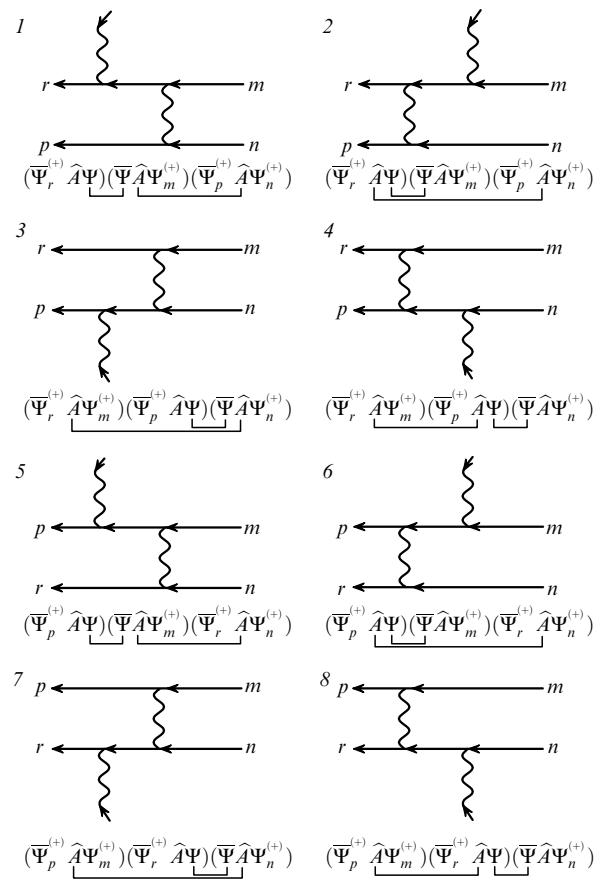


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана e^-e^- -взаимодействия двух атомов с излучением или поглощением фотона.

$$\begin{aligned} & \times \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_l(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}''') \gamma_{\mu}''' \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') + \\ & + \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i[\omega_p^{(+)} - \omega_m^{(+)}]|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|\}}{\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_r^{(+)}} \overline{\Psi}_p^{(+)}(\mathbf{r}') \gamma_{\mu}'^{(+)} \times \\ & \times \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}') \overline{\Psi}_r^{(+)}(\mathbf{r}'') \gamma_{\mu}'' \Psi_l(\mathbf{r}'') \overline{\Psi}_l(\mathbf{r}''') \hat{A}(\mathbf{r}''') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') \Big\}, \quad (2.1) \end{aligned}$$

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, $\overline{\Psi}_{p(r)}^{(+)} = \Psi_{p(r)}^{(+)*} \gamma_4$, $\Psi_{p(r)}^{(+)*}$ — сопряженная волновая функция, $\gamma_4 = \beta$, $\gamma_j = -i\beta\alpha_j$ ($j = 1, 2, 3$),

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

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 про-

тивоположными знаками заряда не может образовать общего решения уравнения Дирака [11]. В данной статье будет использовано следующее решение:

$$\Psi = \sum_r a_r \psi_r^{(+)} + \sum_r b_r \psi_r^{(-)},$$

$$\bar{\Psi} = \sum_r a_r^+ \bar{\psi}_r^{(+)} + \sum_r b_r \bar{\Psi}_r^{(-)}, \quad (2.1a)$$

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:

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

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 $\Delta\xi/a$. Перейдем к системе единиц, в которой $c \neq 1$, и предположим, что

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

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

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

Исключим частоты в выражении (2.3а), используя уравнения $H'''\psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') = \omega_n^{(+)}\psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''')$. Тогда получим, что имеет место следующее преобразование:

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

где введены обозначения

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

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 последующие рассмотрения учитывают взаимодействие двух атомных электронов произвольной мультипольности.

Операторы Гамильтона отдельных атомов с неподвижными ядрами имеют вид

$$\begin{aligned} H'' &= c\mathbf{a}''\mathbf{p}'' + \gamma_4'' mc^2 - \frac{Z_1 e^2}{\xi''}, \\ H''' &= c\mathbf{a}'''\mathbf{p}''' + \gamma_4''' mc^2 - \frac{Z_2 e^2}{\xi'''}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\mathbf{p}'', \mathbf{p}'''$ — операторы импульса электронов, Z_1, Z_2 — заряды точечных ядер. Очевидно, что в операторы (2.7) можно ввести и другие члены, определяющие, например, неточечность ядра (остова) атома, спин ядра и т.д. Вычислим коммутаторы в (2.5), полагая, что ядра атомов неподвижны. Тогда при $\hbar \neq 1$ имеем

$$\begin{aligned} [f_1, H'''] &= -i\hbar ca^2 \frac{(\mathbf{a}''\mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|^2}, \\ [H'', [H''', f_2]] &= ac^2 [\mathbf{a}''\mathbf{p}'', [\mathbf{a}'''\mathbf{p}''', |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|]] + \\ &+ a^3 c^2 \left[\mathbf{a}''\mathbf{p}'', \left[\mathbf{a}'''\mathbf{p}''', \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} \right] \right]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

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

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

где

$$R_{1I} = \frac{\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}}{\omega_l - \omega_m^{(+)}} , \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} .$$

В частном случае резонансного обмена фотонами имеем $R_{1I} = 1$, и оператор (2.8) переходит в соответствующий оператор [4]. При $a \rightarrow 0$ и $R_{1I} = 1$ оператор (2.9) совпадает с оператором Брейта [11]. 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 время представляет собой время передачи взаимодействия между зарядами, и 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 жестким, если рассматриваются протяженные 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 передачи взаимодействия $T_e = r/c$ использовалось также характерное время $T_a = 2\pi/\omega_0$. При этом $2\pi T_e \ll T_a$, т.е. заметное изменение электронной плотности в системе двух взаимодействующих движущихся электронов происходит за время передачи взаимодействия. Очевидно, что это 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 передачи взаимодействия $T_e = a/c$ значительно больше характерного внутриатомного временного масштаба T_a . Это приводит к дополнительному запаздыванию во взаимодействии 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 учета 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_{1l} . 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 3-го 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

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

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 p и m одинаковы.

Схема A. 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 свое 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 $\exp\{i(c/a)|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\}$. 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 B. 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 C. При $E_r^{(+)} = E_m^{(+)}$, когда свое квантовое состояние меняет лишь один из атомов с излучением или поглощением реального фотона с энергией $\hbar\omega = |E_p^{(+)} - E_n^{(+)}|$, возможно взаимодействие с фактуром 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]:

$$\Psi_n^{(+)} = \begin{pmatrix} \varphi_n^{(+)} \\ \frac{\sigma \mathbf{p}}{2mc} \varphi_n^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \varphi_n^{(+)} = \left(1 - \frac{p^2}{8m^2c^2}\right) \Phi_n^{(+)}. \quad (3.1)$$

Применим эти преобразования для вычисления матричного элемента

$$\langle \Psi_l^{(\prime\prime)}(\mathbf{r}'') \Psi_p^{(+)*}(\mathbf{r}''') | B_{1l} | \Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Psi_n^{(+)}(\mathbf{r}''') \rangle, \quad (3.2)$$

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:

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

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{8m^2c^2} \Phi_l^{(+)*}(\mathbf{r}'') [\mathbf{p}'''^2 \Phi_p^{(+)}(\mathbf{r''''})]^* \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r''''}) + \\
& + \frac{1}{8m^2c^2} [\mathbf{p}''^2 \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r}'')]^* \Phi_p^{(+)}(\mathbf{r''''}) \Phi_m^{(+)}(\mathbf{r}'') \Phi_n^{(+)}(\mathbf{r''''}) \Big\} \times \\
& \times \frac{d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|}, \tag{3.3}
\end{aligned}$$

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

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

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. Учтем, 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:

$$V_1^{(+)} = e^2 \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| a \right\} \frac{1}{r}, \quad r = |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|. \tag{3.5}$$

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_{1l} с помощью двухкомпонентных волновых функций $\Phi_n^{(+)}$. Подставляя волновые функции (3.1) в матрицу (2.1) и перемножая матрицы в подынтегральном выражении, получим, что во всех получающихся членах достаточно заменить φ на Φ , так как они уже содержат множитель $1/c^2$. Проделаем 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]

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

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 $\exp \{(i/c)|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\}$, а также дополнительными членами в (3.6). В частном случае резонансного взаимодействия двух электронов без излучения или поглощения фотона $R_{1l} = 1$. Оператор, про-

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

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

При $a \rightarrow 0$ и $R_{1l} = 1$ 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 $R_{1l} = 1$ (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_{1l} имеют вид [17]

$$\begin{aligned}
V_{4l}^{(+)} = & \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| a \right\} \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \left\{ \left(\frac{1}{2} R_{1l} - 1 \right) \times \right. \\
& \times \frac{1}{r^2} (2\boldsymbol{\sigma}''[\mathbf{n} \mathbf{p}'''] - 2\boldsymbol{\sigma}''''[\mathbf{n} \mathbf{p}'']) + \frac{1}{2} R_{1l} \frac{1}{r^2} \times \\
& \times (2\boldsymbol{\sigma}''[\mathbf{n} \mathbf{p}'''] + 2\boldsymbol{\sigma}''''[\mathbf{n} \mathbf{p}'''] - 2\boldsymbol{\sigma}''''[\mathbf{n} \mathbf{p}'''] - 2\boldsymbol{\sigma}''''''[\mathbf{n} \mathbf{p}''']) + \\
& \left. + 3R_{1l} \frac{a^2}{r^4} \boldsymbol{\sigma}''[\mathbf{n} \mathbf{p}''] \right\}. \tag{3.8}
\end{aligned}$$

При $a \rightarrow 0$ и $R_{1l} = 1$ 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 запаздывания* 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 $V_{1l}^{(+)} + V_{3l}^{(+)}$. 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]:

$$\begin{aligned}
V_{1l}^{(+)} + V_{3l}^{(+)} = & \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| a \right\} \times \\
& \times \left\{ \frac{(\mathbf{d}'' \mathbf{d}''') - 3(\mathbf{n} \mathbf{d}'') (\mathbf{n} \mathbf{d}''')}{a^3} + \frac{e}{mc} \frac{(\mathbf{d}''' \mathbf{p}'') - 3(\mathbf{n} \mathbf{d}''') (\mathbf{n} \mathbf{p}'')}{a^2} + \right. \\
& + \frac{e^2}{m^2 c^2} \left[\left(\frac{1}{2} R_{1l} - 1 \right) \frac{(\mathbf{p}'' \mathbf{p}''')}{a} - \frac{1}{2} R_{1l} \frac{(\mathbf{n} \mathbf{p}'') (\mathbf{n} \mathbf{p}''')}{a} - \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{2} R_{1l} \frac{(\mathbf{p}'' \mathbf{p}''') - 3(\mathbf{n} \mathbf{p}'') (\mathbf{n} \mathbf{p}''')}{a} \right] \right\}, \tag{3.9}
\end{aligned}$$

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 $R_{1l} = 1$, 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

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

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 преобразований 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 напряженности 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:

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

где $x = x, y, z$. Каждый из полученных операторов перехода может вызывать квантовый переход атомного электрона из некоторого промежуточного состояния $\Phi_l^{(+)}$ в конечное состояние $\Phi_r^{(+)}$, 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. Учет 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. Это влияние входит косвенным образом через промежуточные виртуальные состояния электронов. При этом начальные и конечные состояния являются электронными состояниями с положительной энергией. Учет позитронных промежуточных состояний может быть произведен при переходе к двухкомпонентным волновым функциям в (2.1) с использованием волновых функций вида

$$\Psi_l^{(-)} = \begin{pmatrix} -\frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{2mc} \chi_l^{(-)} \\ \chi_l^{(-)} \end{pmatrix}, \quad \chi_l^{(-)} = \left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \Phi_l^{(-)}. \quad (4.6)$$

При этом можно не переходить к волновой функции позитрона, содержащей преобразование зарядового сопряжения [11]. Однако выберем другой путь учета 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, введем проекционные операторы

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

обладающие следующими свойствами:

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

Тогда, применяя преобразование из раздела 2, выделим в первом и втором слагаемых матрицы (2.1) следующий оператор:

$$P_{1l}^+ = \frac{e}{2mc^2} (\gamma'_4 \gamma'_\delta A'_\delta A'_- B_{1l} + B_{2l} A''_- \gamma''_4 \gamma''_\delta A''_\delta), \quad (4.10)$$

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 (4.10):

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

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

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

Предположим, что взаимодействие двух атомных электронов происходит в переменном внешнем поле и оператор векторного потенциала \mathbf{A} удовлетворяет условию Лоренца $\partial A_\mu / \partial x_\mu = 0$, $\mu = 1, 2, 3, 4$. В этом случае можно положить [11]

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

Тогда оператор (4.11) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} P_1^+ = \frac{e^3}{2mc^2} \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}| a \right\} & \left\{ -2i(\mathbf{A}'' \mathbf{n}'') \frac{a}{r^2} + \right. \\ & + 2\sigma'' [\mathbf{A}'' \mathbf{n}] \frac{a}{r^2} + \frac{\hbar}{mc} (\mathbf{A}'' \mathbf{n}) \frac{1}{r^2} + \frac{i\hbar}{mc} \sigma'' [\mathbf{A}'' \mathbf{n}] \frac{1}{r^2} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{i}{2mc} \frac{1}{r} (\mathbf{p}'' \mathbf{A}'') - \frac{1}{2mc} \frac{1}{r} \sigma'' [\mathbf{p}'' \mathbf{A}''] + \frac{i}{mc} \frac{1}{r} (\mathbf{A}'' \mathbf{p}''') - \\ & \left. - \frac{i}{2mc} \frac{1}{r} \left(\sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_\alpha p'''_\alpha A''_\beta p'''_\beta - \sum_{\alpha \neq \beta} \sigma''_\alpha p'''_\alpha A''_\beta \sigma'''_\beta \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

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. 1, с одинаковыми факторами запаздывания $\exp\{(i/c)|\omega_n^{(+)} - \omega_p^{(+)}|a\}$, примут следующий вид:

$$\begin{aligned} A_{i \rightarrow f}^{(3)} = \sum_{s, s'} \sum_{l_+} & \left\{ \frac{\langle \Phi_r^{(+)} | R_s^+ | \Phi_l^{(+)} \rangle \langle \Phi_l^{(+)} \Phi_p^{(+)} | V_{s'l_1}^{(+)} | \Phi_m^{(+)} \Phi_n^{(+)} \rangle}{\hbar [\omega_l(1 - i0) + \omega - \omega_r^{(+)})]} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle \Phi_r^{(+)} \Phi_p^{(+)} | V_{s'l_2}^{(+)} | \Phi_l^{(+)} \Phi_n^{(+)} \rangle \langle \Phi_l^{(+)} | R_s^+ | \Phi_m^{(+)} \rangle}{\hbar [\omega_l(1 - i0) - \omega - \omega_m^{(+)})]}, \right. \end{aligned} \quad (4.15)$$

где операторы $V_{s'l_1}^{(+)}$ и $V_{s'l_2}^{(+)}$ получены из соответствующих операторов B_{1l} и B_{2l} . При перемножении различных матричных элементов в (4.15) будем отбрасывать члены, содержащие $1/c$ в более чем третьей степени. Аналогичный вид примут и остальные члены (2.1). Обозначим их через $B_{i \rightarrow f}^{(3)}$, $C_{i \rightarrow f}^{(3)}$ и $D_{i \rightarrow f}^{(3)}$. Как будет показано ниже, физические смыслы всех выделенных членов в матрице (2.1) будут различными.

5. Поляризующие 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. 1). Аналогичная ситуация имеет место и для второго члена (2.1) с диаграммой Фейнмана 2 (см. рис. 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:

$$\begin{aligned} H_2''' &= -\frac{e}{mc} \mathbf{p}''' \mathbf{A}^{(p)}, \\ \mathbf{A}^{(p)} &= -\frac{e^2}{2mc^2} \frac{1}{r} \exp\left(\frac{i}{c} \omega_0 a\right) \mathbf{A}'' , \end{aligned} \quad (5.2)$$

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, учет 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 поляризующего поля;

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

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 поляризующее поле (5.4) записано в электрическом дипольном приближении с использованием оператора (3.9) для учета обмена виртуальными фотонами. При этом в (5.4) операторы \mathbf{A}' и \mathbf{A}'' были вынесены за знак матричного элемента в этом приближении. Электронное поляризующее 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 формуле (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]:

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

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, соответ-

ствующая процессу поглощения фотона, при котором формируется поляризующее поле (5.4). Используя выражение (5.5), получим вместо (5.4) следующую формулу (индекс m опущен):

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

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

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

[11]. 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 напряженности электронного поляризующего поля согласно (5.6) примет следующий вид:

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

где дифференцирование ведется по координатам точки наблюдения a''' . Аналогичным образом, используя обычное соотношение между векторным потенциалом и напряженностью магнитного поля [11], определим напряженности 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 поляри-

зуемость 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:

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

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

Переход к N -атомной системе можно осуществить путем 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.

Переходим к оптической среде, полагая, что она является непрерывной. Для этого введем 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 напряженности электрического поля [17]:

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

\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 напряженности 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 L_0 . 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 статье 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:

$$H_3''' = -\frac{\hbar e}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}''' \mathbf{H}^{(e)}), \quad (5.14)$$

где напряженность магнитного поля есть

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

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 введем следующие обозначения:

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

где $(\alpha_\sigma)_m$ — 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:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)} &= \mu_B \left\{ \alpha_\sigma \frac{\mathbf{h} - 3(\mathbf{h}\mathbf{n})\mathbf{n}}{r^3} - 15\omega_0 \alpha_q \frac{a^2}{r^5} (\mathbf{h}\mathbf{n}) + \right. \\ &\left. + 9\omega_0 \alpha_q \frac{a^2}{r^5} \mathbf{h} \right\} [\mathbf{H}'] \equiv \mathbf{K}_\sigma(\mathbf{a}', \mathbf{a}'') [\mathbf{H}'], \end{aligned} \quad (5.17)$$

где μ_B — магнетон Бора, \mathbf{h} — единичный вектор вдоль направления вектора напряженности 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 напряженности магнитного поля в некоторой точке наблюдения \mathbf{r} в момент времени t внутри или вне среды для спиновых квантовых переходов примет следующий вид [17]:

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

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 — проблеме 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 удается 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 напряженностей электрического и магнитного полей классической оптики [18] по существу эквивалентны уравнениям Максвелла. Однако на основе интегральных уравнений удается строгим образом получить формулу Лорентца — Лоренца и теорему погашения, а также решить целый ряд важных оптических задач. И все-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 посвящен данный обзор, где вначале исследуется проблема двух электронов в рамках квантовой электродинамики.

ники. 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 счет учета 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 бытьложен 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 в данном обзоре как эффекты третьего порядка квантовой электродинамики. Как было показано выше, 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. Обратим внимание на важную особенность этого типа взаимодействия. А именно, исчезновение фотона и его поглощение происходят в один и тот же момент времени, т.е. можно говорить о мгновенности формирования поляризующего поля благодаря непрерывному обмену виртуальными фотонами между атомными электронами. В противном случае будет нарушен закон сохранения (2.10). Фактор запаздывания $\exp[(i/c)\omega_0 a]$ в различных членах матрицы (2.1) указывает лишь на периодическую зависимость эффективной энергии взаимодействия от межатомного расстояния.

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 индуциро-

ванного дипольного момента атома-поляризатора, равного αE , где α — электронная поляризуемость атома-поляризатора, E — напряженность электрического поля в месте расположения этого атома. Учитывая это свойство поляризующих полей, можно применять для вывода нелокальных уравнений электродинамики полуklassический 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 αE_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 полуklassический метод следует рассматривать как дополнительный к квантовоэлектродинамическому методу, поскольку только в квантовоэлектродинамическом методе удается 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 полуklassического 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 учтем с помощью запаздывающих потенциалов [4]. Проведем разложение запаздывающих потенциалов по малому параметру (2.4) и ограничимся членами порядка v^2/c^2 в функции Гамильтона. 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 ее поверхности, \mathbf{E}_I — напряженность 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 феноменологически более общее представление вектора поляризации в зависимости от поля \mathbf{E} внутри среды. Для активированных

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

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

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

В дискретно-непрерывном диэлектрике вокруг точки наблюдения учитывается малая область, обнесенная сферой Лоренца, 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 учета этого эффекта нелокальное уравнение примет вид [22]

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

где V_1 — объем диэлектрика, занятый непрерывно распределенными атомами; суммирование производится по всем дискретно распределенным атомам внутри сферы Лоренца с индуцированными дипольными моментами \mathbf{d}_a , зависящими от запаздывающих моментов времени $t - R_a/c$; R_a — расстояние от a -го атома до точки наблюдения в центре сферы Лоренца.

Дискретно-непрерывные свойства диэлектрика вблизи поверхности удобно представлять путем разбиения приповерхностного слоя на отдельные слои. Рассмотрим сверхтонкую диэлектрическую пленку как систему N монослоев, отделенных друг от друга расстоянием a_0 , где a_0 — постоянная решетки. Окружим точку наблюдения $\mathbf{r} = x, y, z$, которая может находиться внутри или вне пленки, 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 слоев. Изменение положения точки наблюдения относительно обрамляющих поверхностей пленки в плоскости x' , y' приводит к смещению цилиндра как целого в этой же плоскости. Тогда нелокальное уравнение для напряженности 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]

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

где внешнее поле в пределах l -го монослоя имеет вид

$$\mathbf{E}_{II}(x, y) = \mathbf{A}_I(x, y, z), \quad \mathbf{E}_l(x, y) \equiv \mathbf{E}(x, y, z_l), \\ \mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (6.5)$$

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

$$R_j = [(x - x'_j)^2 + (y - y'_j)^2 + (z - z'_j)^2]^{1/2},$$

$$R_{aj} = [(x - x'_a)^2 + (y - y'_a)^2 + (z - z'_j)^2]^{1/2}.$$

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

Пусть на пленку падает плоская волна под углом θ_I . Тогда

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{0I} \exp(ik_0 \mathbf{s}_I \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{s}_I = (-\sin \theta_I, 0, -\cos \theta_I). \quad (6.6)$$

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

$$\mathbf{E}_l(x, y) = \mathbf{E}_l \exp(-ik_0 \sin \theta_I x). \quad (6.7)$$

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

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

где $C = \alpha/a_0^3$, тензор $\hat{\Pi}$ определен в приложении (см. пункт А),

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

Рассмотрим переход от уравнения (6.8) для дискретно-непрерывной диэлектрической среды к соответствующему уравнению распространения волн в непрерывной среде. Для этого необходимо положить $a_0 \rightarrow 0$. Тогда уравнение (6.8) примет следующий вид:

$$\mathbf{E}_l(z) = \mathbf{E}_{II} - i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_I} \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{s}_I \times (\mathbf{s}_I \times \mathbf{E}_j)] \times \\ \times \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_I (l-j)] - i2\pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_I} \times \\ \times \sum_{j=l+1}^N [\mathbf{s}_R \times (\mathbf{s}_R \times \mathbf{E}_j)] \exp[ik_0 a_0 \cos \theta_I (j-l)] + \\ + \pi C \frac{a_0}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \mathbf{E}_l. \quad (6.10)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \left[1 - \pi C \frac{a_0}{\varepsilon}\right] E^y(z) = A_I^y(z) + i \frac{2\pi k_0}{\cos \theta_I} \int_{-h}^0 P^y(z') \times \\ \times \exp [ik_0 \cos \theta_I |z - z'|] dz'. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Учтем, что $\varepsilon = (3/4)a_0$, и применим формулу Лорентца — Лоренца

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

для показателя n среды. Тогда получим, что

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

Таким образом, в левой части уравнения (6.12) стоит y -компоненты макроскопического поля в среде. В случае нормального падения внешней волны на границу получим из (6.12) следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \left[1 - \frac{4\pi}{3} C\right] E^y(z) = A_I^y(z) + \\ + i 2\pi k_0 \int_{-h}^0 P^y(z') \exp [ik_0 |z - z'|] dz'. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Это уравнение в сочетании с оптическими уравнениями Блоха [24] при учете эффекта локального поля [25, 26] применяется для описания оптического сверхизлучения Дике в сверхтонких пленках резонансных атомов [27] и для решения ряда граничных задач нелинейной резонансной оптики полубесконечных диэлектрических сред [28–30].

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 нелокальные 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]:

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

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

где

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

$R_{jl} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|$, $\mathbf{E}_I(\mathbf{r})$, $\mathbf{H}_I(\mathbf{r}_l)$ — напряженности 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

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

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

$$\begin{aligned} \varphi_c(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^N \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}, \\ \mathbf{A}_c(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^N \frac{e}{2c} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} [\mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_j \mathbf{n}_j) \mathbf{n}_j], \end{aligned} \quad (6.20)$$

где $\mathbf{n}_j = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$, \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 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|/c$ в предположении, что плотность электронов не успевает заметно измениться за это время [4].

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

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

$$\varphi_v(\mathbf{r}, t) = \sum_{\beta=1}^{n_z} \sum_{z=1}^{N_A} \frac{e_\beta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{z\beta}|}, \quad (6.21)$$

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

где n_z — число электронов в z -м атомном остатке, N_A — число атомных остатков, $\mathbf{n}_{z\beta}$ — единичный вектор, соединяющий точку наблюдения \mathbf{r} и радиус-вектор $\mathbf{r}_{z\beta}$ местоположения β -го электрона в z -м атомном остатке. Выражения (6.21) также получены из запаздывающих потенциалов, однако при этом разложение запаздывающих потенциалов производилось по величине $(\mathbf{a}_z/a_z)(\xi_{z\beta}/c)$ с учетом 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 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{z\beta}|$ и $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{z\beta}|^{-1}$ в степенной ряд, ограничиваясь линейными по $\xi_{z\beta}$ членами и учитывая при этом, что $\xi_{z\beta} \ll |\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|$, т.е. что точки наблюдения находятся на значительном удалении от атомных остатков. После ряда преобразований получим скалярный потенциал z -го атома в следующем виде:

$$\varphi_{vz}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|} N_z |e| + \frac{\mathbf{r} - \mathbf{a}_z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|^3} \mathbf{d}_z, \quad (6.22)$$

где N_z — число электронов, отдаенных z -м атомом, $\mathbf{d}_z = \sum e_\beta \xi_{z\beta}$ — электрический дипольный момент z -го атома.

Преобразуем теперь векторный потенциал \mathbf{A}_{vz} в электрическом дипольном приближении. После ряда преобразований получим

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{vz} = & \frac{1}{c} \frac{\mathbf{d}_z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|} - \frac{1}{c} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{a}_z)((\mathbf{r} - \mathbf{a}_z)\dot{\mathbf{d}}_z)}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|^3} - \\ & - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{a}_z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|^2} N_z |e| - \frac{2(\mathbf{r} - \mathbf{a}_z)((\mathbf{r} - \mathbf{a}_z) \mathbf{d}_z)}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|^4} + \frac{\mathbf{d}_z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|^2}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Применим свойство электрической нейтральности системы зарядов, которое определим как

$$\sum_{z=1}^{N_A} \frac{N_z |e|}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|} - \sum_{j=1}^N \frac{|e|}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} = 0. \quad (6.23a)$$

Тогда с помощью выражений (6.22) и (6.23), дифференцируя (6.22) по координатам точки наблюдения и полагая, что векторы \mathbf{a}_z от времени не зависят, получим напряженность электрического поля z -го атомного остатка

$$\mathbf{E}_{vz} = \text{rot rot} \frac{[\mathbf{d}_z]}{R_z}, \quad (6.24)$$

где $R_z = |\mathbf{r} - \mathbf{a}_z|$ и символ $[\dots]$ означает, что электрический дипольный момент \mathbf{d}_z определен в запаздывающий момент времени $t - R_z/c$.

Аналогичным образом найдем напряженность магнитного поля z -го атомного остатка:

$$\mathbf{H}_{vz} = \text{rot} \mathbf{A}_{vz} = \left\{ \frac{1}{c R_z^3} [\dot{\mathbf{d}}_z] + \frac{1}{c^2 R_z^2} [\ddot{\mathbf{d}}_z] \right\} [\mathbf{u}_z \times \mathbf{R}_z], \quad (6.25)$$

где \mathbf{u}_z — единичный вектор вдоль электрического дипольного момента \mathbf{d}_z .

Вычислим теперь напряженности 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 (6.23a) системы, имеем

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

Вычислим производные по времени:

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

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):

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

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 учетом этих свойств оптической среды получим следующее уравнение для напряженности электрического поля [34]:

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

где $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — напряженность 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 напряженности магнитного поля [34]:

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

где \mathbf{H}_I — напряженность 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 интегро-дифференциальными 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 поляризацией 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. На рисунках 2, 3 показаны теоретические и экспериментальные зависимости, представленные в [18], а также результаты, полученные с помощью развитой в [34] теории.

Итак, с помощью квантовоэлектродинамического и полуклассического методов выведены уравнения (5.11), (5.18) для квантованных полей и с учетом спиновых 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

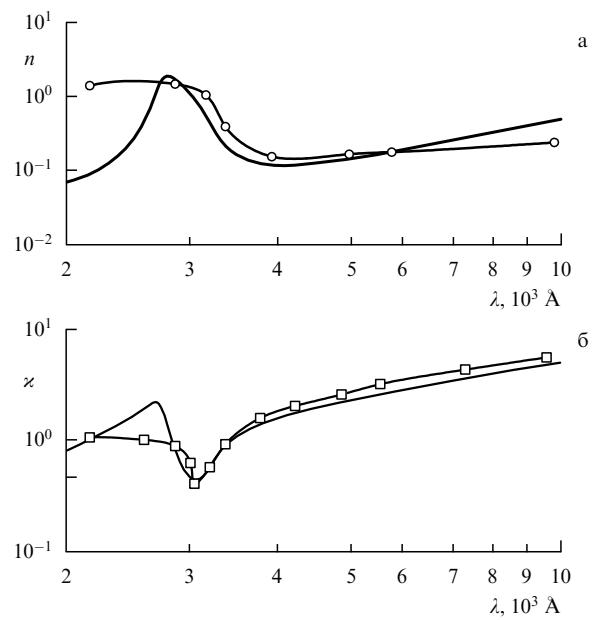


Рис. 2. Теоретические и экспериментальные (помечены символами) зависимости для показателя преломления (а) и показателя поглощения (б) металлического серебра.

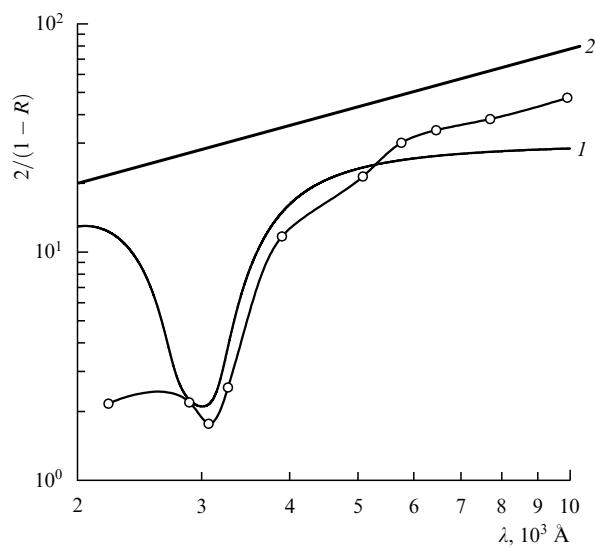


Рис. 3. Теоретические и экспериментальная (помечена символами) зависимости отражательной способности границы раздела вакуум–серебро: 1 — предлагаемая теория, 2 — теория, представленная в книге [18]; $f = 0,05$, $\Gamma = 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\omega_0 = 7,95 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\beta = 4,17 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $(N_A/V) = 5,86 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $N/V = 0,4(N_A/V)$.

точках среды. Ниже будут представлены решения ряда типовых задач классической и нелинейной оптики, в которых свойство нелокальности уравнений электродинамики имеет принципиальное значение.

7. Спонтанное излучение атома вблизи границы раздела вакуум–диэлектрик и эффект ближнего поля

Рассмотрим спонтанное излучение двухуровневого атома в ближней зоне на расстоянии $L \ll \lambda_0$ ($\lambda_0 = 2\pi c/\omega$, ω — частота излучаемых фотонов) по отношению к

поверхности Σ диэлектрика, который характеризуется поляризуемостью α , концентрацией (N/V) и показателем преломления n_0 . Решению этой граничной задачи квантовой оптики посвящены работы [35–42]. Рассмотрим основные результаты этих работ. Так, в [35] получено следующее выражение для амплитуды квантового перехода атома:

$$b(t) = \exp \{ -K_0 [1 + R \exp(2ik_0 L)] t \}, \quad (7.1)$$

где $K_0 = \pi d\omega / (\hbar A c)$; A — эффективная площадь поверхности; $k_0 = \omega/c$; $R = -(n_0 - 1)/(n_0 + 1)$ — коэффициент отражения, соответствующий формуле Френеля для нормального падения света.

Из формулы (7.1) можно определить время жизни возбужденного состояния атома, равное

$$\{K_0[1 + R \cos(2k_0 L)]\}^{-1},$$

и смещение частоты атома, равное

$$K_0 R \sin(2k_0 L).$$

Следующий важный результат статьи [35] заключается в выводе квантового аналога теоремы погашения Эвальда–Озеена, хорошо известной в классической оптике диэлектриков [18]. При этом диэлектрик в [35] рассматривается как непрерывная оптическая среда.

Рассмотрим решение поставленной граничной задачи, учитывая дискретно-непрерывные свойства диэлектрика. Будем предполагать, что точка наблюдения \mathbf{r}_0 (рис. 4) окружена сферой Лоренца с радиусом L_0 и внутри сферы Лоренца атомы диэлектрика распределены дискретным образом. Вне сферы Лоренца атомы распределены непрерывно, и в зависимости от местоположения точки наблюдения \mathbf{r}_0 число дискретно-распределенных атомов меняется. Как будет показано ниже, существование двух пространственных масштабов λ_0 и L_0 при описании спонтанного распада атома приводит к эффекту ближнего поля (near-field effect). Внутри замкнутой сферы Лоренца дискретно-распределенные атомы создают равное нулю поле в центре сферы при любом типе симметрии этого распределения, если принимать во внимание только кулоновское поле, пропорциональное R_a^{-3} , где R_a — расстояние от a -го атома внутри сферы Лоренца до ее центра. Непосредственным вычислением поляризующих полей внутри сферы Лоренца можно показать, что запаздывающее поле, пропорциональное $1/R_a$, всегда отлично от нуля в центре сферы Лоренца при любом типе симметрии дискретно-распределенных атомов. Однако с наибольшей полнотой эффект ближнего поля должен проявляться, когда сфера Лоренца

является усеченной, что имеет место при приближении точки наблюдения к поверхности Σ оптической среды. Именно это и было учтено при решении поставленной граничной задачи в работе [42].

Применим оператор $\mathbf{A}^{(e)}$ электронного поляризующего поля (5.10) и представим оператор взаимодействия двухуровневого атома вблизи поверхности следующим образом:

$$H_1 = 2 \frac{\omega_0}{c} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} r_2 + \text{э. с.} \quad (7.2)$$

Здесь ω_0 — резонансная частота атома в точке \mathbf{r}_0 ; индексы $\mathbf{k}\lambda$ определяют моду фотонов с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией $\lambda = 1, 2$; r_2 — оператор эффективного спина двухуровневого атома, $r_i = (1/2)\sigma_i$ ($i = 1, 2, 3$), σ_i — матрицы Паули; $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}$ — оператор векторного потенциала поля фотонов в месте расположения атома; $\mathbf{d}_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}}$ — эффективный дипольный момент атома, имеющий вид [42]

$$\mathbf{d}_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}} = d_0 \mathbf{u}_d \left\{ \frac{(N/V)\alpha}{(n_0^2 - 1)k_0^2} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} (I_\Sigma - I_{\Sigma_0} + I_{\Sigma_z}) + \mathbf{S} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_0) \right\}, \quad (7.3)$$

где \mathbf{u}_d — единичный вектор вдоль дипольного момента атома, d_0 — дипольный момент перехода резонансного атома, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ — единичный вектор поляризации спонтанного фотона моды $\mathbf{k}\lambda$,

$$I_\Sigma = -2\pi \exp(i k_0 \mathbf{s}_R \mathbf{r}) \frac{\sin(\theta_I - \theta_T)}{\sin \theta_T \cos \theta_T}, \quad (7.4)$$

θ_I — угол падения спонтанного фотона на поверхность Σ ,

$$\mathbf{s}_R = (-\sin \theta_I, 0, \cos \theta_I) \quad (7.5)$$

— единичный вектор, θ_T — угол преломления спонтанных фотонов, при этом $n_0 \sin \theta_T = \sin \theta_I$ в соответствии со свойством однородности поверхности Σ . Величины I_{Σ_0} и I_{Σ_z} есть поверхностные интегралы по кругу, образованному пересечением сферы Лоренца и поверхности Σ , и по части сферы Лоренца в среде соответственно;

$$\mathbf{S} = \alpha \sum_a [i(\mathbf{k}\mathbf{r}_a + k_0 R_a)] \left[\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \left(\frac{ik_0}{R_a^2} + \frac{k_0^2}{R_a} \right) - k_0^2 n_a \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{n}_a)}{R_a} - 3ik_0 \mathbf{n}_a \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{n}_a)}{R_a^2} + \frac{3\mathbf{n}_a(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{n}_a) - \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}}{R_a^3} \right], \quad (7.6)$$

$\mathbf{R}_a = \mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_a$, $\mathbf{n}_a = \mathbf{R}_a/R_a$, \mathbf{r}_a — радиус-вектор a -го атома внутри сферы Лоренца относительно начала координат (см. рис. 4).

Как показывает численный анализ, максимальный вклад в эффективный дипольный момент (7.3) дает величина \mathbf{S} , отвечающая области дискретного распределения, а именно, последнее слагаемое в (7.6), зависящее от координат как $1/R_a^3$, которое соответствует кулоновскому взаимодействию резонансных атомов.

С помощью гамильтониана (7.2) найдем гейзенберговские уравнения движения для фотонных операторов [42]

$$c_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}_0, t) = c_{\mathbf{k}\lambda}^v(\mathbf{r}_0, t) - \frac{i}{\hbar} 2 \frac{\omega_0}{c} (d_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}})^* g_{\mathbf{k}\lambda} \times \int r_2(t', \mathbf{r}_0) G_{\mathbf{k}\lambda}(t - t') dt', \quad (7.7)$$

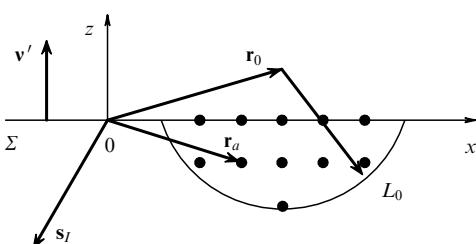


Рис. 4. Схема расположения векторов в граничной задаче: Σ — поверхность $z = 0$, \mathbf{r}_0 — радиус-вектор местоположения двухуровневого атома, \mathbf{s}_I — единичный вектор вдоль направления высовечивания фотона, L_0 — радиус сферы Лоренца, \mathbf{v}' — внешняя нормаль к поверхности Σ .

где $g_{\mathbf{k}\lambda} = [2\pi\hbar c^2/(V_R \omega_{\mathbf{k}})]^{1/2}$; V_R — объем квантования поля; $\omega_{\mathbf{k}}$ — частота фотона моды $\mathbf{k}\lambda$;

$$G_{\mathbf{k}\lambda}(t - t') = \begin{cases} 0, & t < t', \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \exp \{-i(\omega_{\mathbf{k}} - \varepsilon i)(t - t')\}, & t > t', \end{cases} \quad (7.8)$$

— запаздывающая функция Грина [24]; фотонный оператор

$$c_{\mathbf{k}\lambda}^v(\mathbf{r}_0, t) = c_{\mathbf{k}\lambda}(0) \exp \{i(\mathbf{k}\mathbf{r}_0 - \omega_{\mathbf{k}}t)\} \quad (7.9)$$

соответствует свободному (вакуумному) полю фотонов.

Уравнения (7.7) необходимо дополнить уравнениями для атомных операторов [24]

$$\begin{aligned} \dot{r}_1 &= -\omega_0 r_2 + 2\frac{\omega_0}{\hbar c} d^{\text{eff}} A r_3, \\ \dot{r}_2 &= \omega_0 r_1, \\ \dot{r}_3 &= -2\frac{\omega_0}{\hbar c} d^{\text{eff}} A r_1, \end{aligned} \quad (7.10)$$

где

$$d^{\text{eff}} A = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (7.10a)$$

и величина $\mathbf{d}_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}}$ зависит от местоположения атома относительно поверхности Σ согласно формуле (7.3).

С помощью уравнений (7.10), (7.7) в рамках адиабатического приближения [24], применяя нормальное упорядочение операторов после вакуумного усреднения, получим следующую формулу для времени жизни τ возбужденного состояния атома вблизи поверхности [42]:

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \left(\frac{\omega_0}{\hbar c} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}\lambda} |d_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}}|^2 g_{\mathbf{k}\lambda}^2 [\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) - \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega_0)], \quad (7.11)$$

где $\delta(x)$ — δ -функция Дирака.

Смещение энергии атома вблизи поверхности будет определяться следующей формулой [42]:

$$\delta = \left(\frac{\omega_0}{\hbar c} \right) \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(\frac{\mathcal{P}}{\omega_{\mathbf{k}} + \omega_0} - \frac{\mathcal{P}}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0} \right) g_{\mathbf{k}\lambda}^2 |d_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}}|^2, \quad (7.12)$$

где символ \mathcal{P}/x означает интегрирование в смысле главного значения.

При переходе в волновую зону по отношению к поверхности Σ ($L \gg \lambda_0$) эффективный дипольный момент принимает вместо (7.3) следующий вид:

$$\begin{aligned} d_{\mathbf{k}\lambda}^{\text{eff}} &= d_0 \mathbf{u}_d \left\{ \frac{3}{2(n_0^2 + 2)} \frac{\sin(\theta_T - \theta_I)}{\sin \theta_T \cos \theta_I} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} - \mathbf{s}_R (\mathbf{s}_R \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})] \times \right. \\ &\quad \left. \times \exp(i k_0 \mathbf{s}_R \mathbf{r}_0) + \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \exp(i k_0 r_0) \right\}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Пользуясь этим соотношением, можно показать, что в случае нормального падения ($\theta_I = 0$) выражение для времени жизни атома в возбужденном состоянии совпадает с соответствующим результатом работы [35]. Численный анализ показывает, что время жизни атома в ближней зоне благодаря эффекту ближнего поля, т.е.

учету структурного фактора диэлектрика вблизи поверхности, изменяется в пределах до 30 % по отношению к времени жизни атома в свободном пространстве.

Применение нелокального уравнения (5.11) для решения граничной задачи о спонтанном излучении атома вблизи дискретно-непрерывного диэлектрика в сочетании с уравнениями (7.10) позволяет описать поле спонтанных фотонов не только в точке \mathbf{r}_0 , но также и в любых других точках наблюдения. Для этого в [19, 42] рассмотрен квантовый аналог теоремы погашения Эвальда — Оззена, с помощью которой, в отличие от [35], удается решить трехмерную граничную задачу. При этом численный анализ полученного решения связан с вычислением некоторых поверхностных интегралов, которые возникают и при решении граничных задач для классических полей. Ниже будут рассмотрены некоторые задачи классической и нелинейной оптики с последующим подробным численным анализом полученных решений и применением обобщенной процедуры Эвальда — Оззена.

8. Связь микроскопического и макроскопического полей в дискретно-непрерывном диэлектрике внутри диэлектрика и на его поверхности

Формулы Френеля в классической оптике диэлектриков [18] могут быть выведены с помощью интегрального уравнения (6.1) применением процедуры Эвальда — Оззена [18]. Преимуществом этого подхода по сравнению с традиционным подходом, основанным на применении максвелловских граничных условий [18], является строгий вывод формулы Лорентца — Лоренца и доказательство теоремы погашения, согласно которой отражение и преломление света происходят на математической границе диэлектрика, имеющей бесконечно малую толщину. В уравнении (6.1) предполагается, что диэлектрик является непрерывной оптической средой, где атомы одного типа с электронной поляризуемостью α равномерно с одинаковой концентрацией N/V заполняют диэлектрик. Концепция непрерывности диэлектрика основана на том, что поле дискретно-распределенных диполей внутри сферы Лорентца [43] полагается равным нулю для любого типа симметрии, включая хаотическое распределение [18, 44]. Исключением являются диэлектрики, состоящие из атомов разных типов и имеющие смешанную симметрию, например кристалл типа перовскита [43].

Рассмотрим диэлектрик, состоящий из атомов одного типа с определенным типом симметрии в их распределении внутри диэлектрика и на его поверхности. Пусть точка наблюдения находится внутри диэлектрика, и сфера Лорентца для нее является замкнутой (рис. 5а). Непосредственным вычислением поля диполей сферы Лорентца в центре этой сферы удается показать, что это поле отлично от нуля для любого типа симметрии, включая хаотическое, если наряду с кулоновским полем диполей учитывать также его запаздывающую часть, пропорциональную $1/R_a$. Однако размеры сферы Лорентца значительно меньше длины световой волны λ , т.е. $L_0 \ll \lambda$, поэтому роль запаздывающей части поля диполей будет незначительной. Например, как будет показано ниже, в формуле для показателя преломления в точках наблюдения далеко от поверхности диэлектрика

роль структурного фактора, обусловленная запаздывающей частью поля диполей, оценивается величиной порядка 1 % по отношению к показателю преломления в рамках традиционной концепции непрерывного диэлектрика. Ситуация кардинальным образом меняется, если точка наблюдения находится в ближней зоне по отношению к поверхности диэлектрика (рис. 5б, в). В этих случаях сфера Лорентца является усеченной, поле диполей в центре сферы Лорентца отлично от нуля для любого типа симметрии диэлектрика и доминирующей частью поля диполей является его кулоновская часть, пропорциональная $1/R_a^3$. Таким образом, в оптике диэлектриков следует применять более общую концепцию о дискретно-непрерывном диэлектрике.

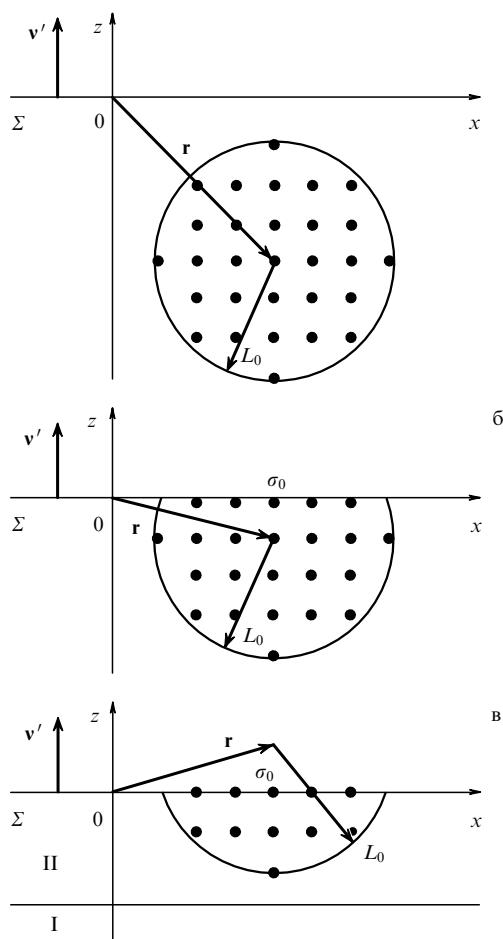


Рис. 5. К концепции о дискретно-непрерывном диэлектрике: (а) точка наблюдения внутри диэлектрика в волновой зоне по отношению к поверхности Σ диэлектрика; (б) дискретно-непрерывное распределение диполей в ближней зоне для преломленной волны; (в) дискретно-непрерывное распределение диполей для отраженной волны в ближней зоне. Области II и I соответствуют ближней и волновой зонам диэлектрика, L_0 — радиус сферы Лорентца, σ_0 — площадь круга, образованного пересечением сферы Лорентца и поверхности Σ , v' — нормаль к поверхности Σ .

Рассмотрим нелокальное уравнение [22]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \int_{\sigma}^{\Sigma} \text{rot rot} \frac{N\alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - R/c)}{R} dV' + \\ + \sum_a \text{rot rot} \frac{\alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t - R/c)}{R_a}. \quad (8.1)$$

2*

Будем предполагать, что диэлектрик составлен из атомов (молекул) одного типа с электронной поляризостью α и концентрацией N . Тип симметрии диэлектрика определяется решеточной суммой по диполям внутри сферы Лорентца. Здесь \mathbf{E}_I — внешняя световая волна; $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ — микроскопическое поле в точке наблюдения \mathbf{r} , которая может находиться внутри или вне диэлектрика, в волновой или ближней зонах по отношению к его поверхности; σ — поверхность, окружающая точку наблюдения. Поле \mathbf{E} , как будет показано ниже, отличается от макроскопического поля \mathbf{E}' в различных точках наблюдения внутри диэлектрика и на его поверхности.

Макроскопическое поле подчиняется уравнениям Максвелла, в которых проведена определенная процедура усреднения микроскопического поля [18]. Установим связь между этими полями с помощью уравнения (8.1) для микроскопического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. В рамках концепции о непрерывном диэлектрике эта связь представляется известным соотношением [18]

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P}. \quad (8.2)$$

Рассмотрим связь между полями \mathbf{E} и \mathbf{E}' в рамках концепции о дискретно-непрерывном диэлектрике в точках наблюдения внутри полубесконечного диэлектрика и вблизи его поверхности (см. рис. 5). Следуя методу [43], запишем следующее равенство для оптических полей:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' + \mathbf{E}_d + \mathbf{E}_L, \quad (8.3)$$

где \mathbf{E}_d — поле диполей внутри сферы Лорентца, \mathbf{E}_L — поле на поверхности этой сферы. При этом

$$\mathbf{E}_d = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2, \\ \mathbf{E}_0 = \frac{1}{N} \sum_a \frac{3\mathbf{n}_a(\mathbf{n}_a \mathbf{P}_a) - \mathbf{P}_a}{R_a^3}, \\ \mathbf{E}_1 = \frac{1}{N} \sum_a \frac{3\mathbf{n}_a(\mathbf{n}_a \dot{\mathbf{P}}_a) - \dot{\mathbf{P}}_a}{R_a^2 c}, \\ \mathbf{E}_2 = \frac{1}{N} \sum_a \frac{3\mathbf{n}_a(\mathbf{n}_a \ddot{\mathbf{P}}_a) - \ddot{\mathbf{P}}_a}{R_a c^2}, \quad (8.4)$$

где $\mathbf{n}_a = \mathbf{R}_a/R_a$, $\mathbf{R}_a = \mathbf{r} - \mathbf{r}_a$, $\mathbf{P}_a = N\alpha \mathbf{E}_a$, $\mathbf{E}_a = \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t - R_a/c)$. Поскольку радиус сферы Лорентца мал, т.е. $k_0 R_a \ll 1$, $k_0 = \omega/c$, ω — частота оптического поля, то будем считать, что

$$\mathbf{E}_a \approx \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t) \approx \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (8.5)$$

в точке наблюдения \mathbf{r} , находящейся в центре сферы Лорентца. Тогда в выражениях (8.4) можно опустить индекс a у вектора поляризации. Пусть вектор поляризации зависит от времени по следующему закону:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t). \quad (8.6)$$

Тогда для замкнутой сферы Лорентца получим равенства

$$\mathbf{E}_0 = \hat{\beta}_0 \mathbf{P}, \quad \mathbf{E}_1 = \hat{\beta}_1 \mathbf{P}, \quad \mathbf{E}_2 = \hat{\beta}_2 \mathbf{P}, \quad (8.7)$$

где диагональные тензоры $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ и $\hat{\beta}_2$ имеют вид

$$(\hat{\beta}_0)_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{N} \sum_a \frac{3n_{ai}^2 - 1}{R_a^3}, \quad (8.8a)$$

$$(\hat{\beta}_1)_{ij} = -i\delta_{ij} \frac{k_0}{N} \sum_a \frac{3n_{ai}^2 - 1}{R_a^2}, \quad (8.8b)$$

$$(\hat{\beta}_2)_{ij} = -\delta_{ij} \frac{k_0^2}{N} \sum_a \frac{n_{ai}^2 - 1}{R_a}, \quad (8.8c)$$

$$i, j = x, y, z.$$

Путем численного анализа можно исследовать вклады полей \mathbf{E}_0 , \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 в поле диполей внутри сферы Лорентца для различных типов симметрии, включая хаотическое. Эти расчеты показывают, что поля \mathbf{E}_0 и \mathbf{E}_1 пренебрежимо малы по сравнению с полем \mathbf{E}_2 . Для замкнутой сферы Лорентца имеем

$$\mathbf{E}_L = \frac{4\pi}{3} \mathbf{P} \quad (8.9)$$

с учетом приближения (8.5). Поэтому в этом случае получим следующее соотношение:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' + \left(\frac{4\pi}{3} + \beta_2 \right) \mathbf{P}, \quad (8.10)$$

где скалярная величина β_2 соответствует диагональным компонентам тензора (8.8в) и является структурным фактором диэлектрика. Очевидно, что роль этого структурного фактора возрастает для точек наблюдения внутри диэлектрика при увеличении множителя k_0^2/N , например в разреженных оптических средах.

Рассмотрим теперь случай усеченной сферы Лорентца для точек наблюдения вблизи поверхности диэлектрика (рис. 5б, в). В этом случае поле Лорентца имеет вид

$$\mathbf{E}_L = \frac{2\pi}{3} \left[1 - \left(\frac{z}{L_0} \right)^3 \right] \mathbf{P}, \quad (8.11)$$

а поле диполей внутри сферы Лорентца имеет все отличные от нуля компоненты (8.7) и доминирующая роль принадлежит полю \mathbf{E}_0 , т.е. $\mathbf{E}_0 \gg \mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2$. Тогда с учетом (8.11) получим следующее соотношение [22]:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' + \left\{ \frac{2\pi}{3} \left[1 - \left(\frac{z}{L_0} \right)^3 \right] + \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 \right\} \mathbf{P}. \quad (8.12)$$

Роль структурного фактора $\hat{\beta}_0$ для точек наблюдения вблизи поверхности полубесконечного диэлектрика может быть значительной для конденсированных сред.

Применяя два определения вектора электрической индукции, принятые в макроскопической электродинамике [18], и соотношение (8.12), можно получить формулу для диэлектрической проницаемости приповерхностного слоя диэлектрика в зависимости от глубины залегания точки наблюдения. В работе [22] формула для показателя преломления приповерхностного слоя была получена с помощью уравнения (8.1) в рамках микроскопической теории. В данном обзоре все граничные задачи решены с помощью соответствующих микроскопических нелокальных уравнений для дискретно-непрерывных диэлектриков. При этом так же, как и в молекуларной теории отражения света [44], взаимодействие между атомами (молекулами) диэлектрика, приводящее к изменению его энергетического спектра, не учитывается. Радиус сферы Лорентца как параметр нелокальности определяется либо численным путем, либо аналитически [23]. Все отклонения от френелевых законов, обусловленные отличием от нуля поля диполей внутри сферы Лорентца, будем в данном обзоре связывать с эффектом ближнего поля.

9. Микроскопическая теория переходного слоя на идеальной поверхности полубесконечных диэлектрических сред и эффект ближнего поля

Рассмотрим граничную задачу классической оптики диэлектриков, когда вектор поляризации оптической среды является линейной функцией поля. В рамках концепции о непрерывном диэлектрике решением этой граничной задачи будут френелевые законы [18]. Рассмотрим эту задачу в рамках концепции о дискретно-непрерывном диэлектрике (см. раздел 8).

Хорошо известно, что при отражении света от зеркальных поверхностей реальных тел наблюдаются аномалии в законах Френеля [45–51]. Особенно отчетливо они проявляются в том, что вблизи угла полной поляризации p -компоненты отраженной волны никогда не гасится полностью и отраженный от поверхности свет является эллиптически поляризованным. Это наблюдается экспериментально как у сред с чистой, так и с загрязненной поверхностью, а также в средах, подвергнутых упругой деформации. Для объяснения этих аномалий в законах Френеля Друде [52–54] высказал предположение, что это может быть обусловлено наличием на границе двух сред с показателями преломления n_1 и n_2 очень тонкого переходного слоя, в котором показатель преломления плавно меняется от n_1 до n_2 . Согласно феноменологической теории Друде [53, 54] влияние такого переходного слоя может быть определено путем пересмотра максвелловских граничных условий, полученных в предположении резкой границы раздела двух сред. Важным результатом теории Друде является то, что по интенсивности и фазе p -компоненты отраженной волны для угла Брюстера была оценена толщина переходного слоя. Следуя теории Друде, толщину переходного слоя удобнее оценивать путем измерения эллиптичности отраженного под углом Брюстера света при условии, что на отражающую поверхность падает волна, линейно поляризованная под углом 45° к плоскости падения. В этом случае для коэффициентов отражения имеем следующую формулу [54]:

$$\frac{r_{pp}}{r_{ss}} = \frac{i k_0 h}{2} \frac{\sqrt{n_1^2 + n_2^2}}{n_1^2 - n_2^2} \eta, \quad (9.1)$$

где $k_0 = \omega/c$ — волновое число в вакууме, h — толщина переходного слоя,

$$\eta = \tilde{n}^2 + n_1^2 n_2^2 \left(\frac{1}{\tilde{n}^2} \right) - n_1^2 - n_2^2;$$

волнистая черта сверху означает интегральное среднее соответствующей величины, n как функция глубины z является показателем преломления переходного слоя.

Феноменологическая теория Друде использует усредненные значения диэлектрической проницаемости среды

в очень тонком переходном слое. Однако если толщина слоя сравнима с размерами образующих его частиц, понятие диэлектрической проницаемости теряет свой непосредственный смысл. В связи с этим в работах [55–57] была разработана микроскопическая теория переходного слоя при использовании теоремы погашения Эвальда–Озенса [18], а также при явном учете неоднородных компонент волнового поля внутри кубической решетки и учете конечности расстояния, на котором лежащие ниже слои перестанут давать свой вклад в поле у поверхности. В этих работах, в частности, было показано, что при учете дискретности среды даже в отсутствие на ее поверхности переходных слоев отражение света происходит так, как если бы решетка представляла собой непрерывную среду с непрерывным переходным слоем на поверхности.

В статье [58] была представлена микроскопическая теория переходного слоя на поверхности полубесконечного поглощающего или непоглощающего диэлектрика. В отличие от указанных выше работ в этой статье не делается никаких предположений о толщине переходного слоя. Вместо этого была решена самосогласованная задача по расчету действующего поля вблизи поверхности и в объеме полубесконечной среды. Кроме того, при расчете микроскопических полей была учтена как кулоновская, так и запаздывающая часть поля диполей. Все это позволило более точно описать свойства переходного слоя, обусловленные эффектом ближнего поля [22].

9.1. Переходный слой на поверхности дискретно-непрерывного диэлектрика

Рассмотрим полубесконечный изотропный диэлектрик, составленный из атомов (молекул) одного сорта, с не зависящей от координат концентрацией N и поляризуемостью α . При этом вначале будем рассматривать точки наблюдения вблизи поверхности. В этом случае сфера Лоренца является усеченной и площадь поверхности этой сферы должна изменяться по мере погружения точки наблюдения в среду. Это приводит к формированию переходного слоя на поверхности. Для описания этого переходного слоя используем тот же метод, что и в работе [23]. А именно, разобъем приповерхностную область на систему слоев, параллельных поверхности, в каждом из которых можно считать поле не зависящим от координаты z (рис. 6). Микроскопическое поле в произвольной точке наблюдения \mathbf{r} в момент времени t определим с помощью следующего интегрального уравнения, которое является модификацией уравнения (6.3):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = & \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=1}^L \int_{V_j} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R} N\alpha \mathbf{E}_j \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ & + \int_V \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R} N\alpha \mathbf{E}_v \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ & + \sum_a \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R_a} \alpha \mathbf{E} \left(\mathbf{r}_a, t - \frac{R_a}{c} \right), \end{aligned} \quad (9.2)$$

где $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — напряженность электрического поля внешней волны; $\mathbf{E}_j(\mathbf{r}, t)$ — напряженность поля в j -м слое; $\mathbf{E}_v(\mathbf{r}, t)$ — напряженность поля в объеме; $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $R_a = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|$; \mathbf{r}_a — радиус-вектор a -го диполя внутри сферы Лоренца; L — количество слоев вблизи поверхности.

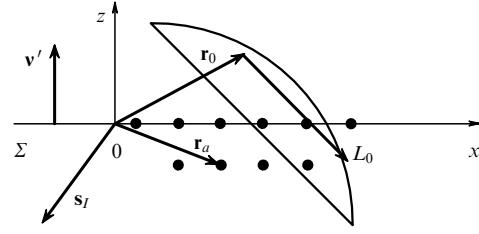


Рис. 6. Переходной слой на границе полубесконечного диэлектрика. Точка наблюдения находится в L -м слое.

сти. Дифференцирование в (9.2) производится по координатам точки наблюдения. Интегрирование производится по объему j -го слоя или по внутренней части V полубесконечного диэлектрика за исключением сферы σ . Вектор поляризации \mathbf{P} в нашем рассмотрении является линейной функцией поля \mathbf{E} , т.е. $\mathbf{P} = N\alpha\mathbf{E}$ с некоторой заданной в общем случае комплексной поляризуемостью α .

Предположим, что падающая волна является монохроматической плоской волной с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k}_I , т.е.

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0I} \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{k}_I \cdot \mathbf{r}). \quad (9.3)$$

Предположим, что плоскость падения совпадает с плоскостью xz , т.е. \mathbf{k}_I имеет только x - и z -компоненты:

$$\mathbf{k}_I = (k_{Ix}, 0, k_{Iz}), \quad k_{Ix} = k_0 \sin \theta_I, \quad k_{Iz} = -k_0 \cos \theta_I,$$

где θ_I — угол падения. Тогда поле в каждом из L слоев может быть представлено в виде

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_j \exp(-i\omega t) \exp(i k_{Ix} x). \quad (9.4)$$

Интегралы по монослям, входящие в уравнение (9.2), могут быть вычислены на основе подхода, подробно изложенного в [23]. Тогда соответствующие члены в (9.2) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} & \int_V \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R} N\alpha \mathbf{E}_j \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ & + \sum_{z_a=z_j} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R_a} \alpha \mathbf{E}_j \left(\mathbf{r}_a, t - \frac{R_a}{c} \right) = \\ & = N\alpha \hat{\Pi}(z - z_j) \mathbf{E}_j - \frac{i 2\pi N \alpha (z_{j-1} - z_j)}{k_0 \cos \theta_I} \times \\ & \times \begin{cases} [\mathbf{k}_I [\mathbf{k}_I \mathbf{E}_j]] \exp[i k_0 \cos \theta_I (z_j - z)], & z < z_j, \\ [\mathbf{k}_R [\mathbf{k}_R \mathbf{E}_j]] \exp[i k_0 \cos \theta_I (z - z_j)], & z > z_j, \end{cases} \end{aligned} \quad (9.5)$$

где \mathbf{k}_R — волновой вектор отраженной волны: $\mathbf{k}_R = (k_0 \sin \theta_I, 0, k_0 \cos \theta_I)$. Вид тензора $\hat{\Pi}$ определен в приложении (пункт Б).

Из (9.2) следует, что для того, чтобы определить поле в произвольной точке вблизи поверхности, необходимо знать поведение поля в объеме. Полагаем, что волна поляризации в объеме среды может быть представлена в виде

$$\mathbf{P} = N\alpha \mathbf{E}_v(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (9.6)$$

причем напряженность поля в объеме $\mathbf{E}_v(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнениям

$$\nabla^2 \mathbf{E}_v(\mathbf{r}) + k_0^2 n^2 \mathbf{E}_v(\mathbf{r}) = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{E}_v = 0, \quad (9.7)$$

где n — показатель преломления среды, определяющий закон дисперсии, т.е. зависимость волнового вектора волны поляризации от частоты. Показатель преломления в нашем рассмотрении в общем случае является комплексной величиной. Применим теорему Грина и перейдем от объемного интеграла к поверхностному. Получим следующее равенство:

$$\begin{aligned} & \int_V \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R} N\alpha \mathbf{E}_v \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ & + \sum_{z_a < z_L} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{R_a} \alpha \mathbf{E}_v \left(\mathbf{r}_a, t - \frac{R_a}{c} \right) = \\ & = N\alpha \operatorname{rot} \operatorname{rot} \int_{\Sigma_L} \left(\mathbf{E}_v \frac{\partial G}{\partial v'} - G \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial v'} \right) dS' + N\alpha \hat{\beta} \mathbf{E}_v(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (9.8)$$

$G(R) = \exp(i k_0 R)/R$, $\partial/\partial v'$ указывает дифференцирование вдоль внешней нормали к поверхности Σ_L (см. рис. 6). Оператор $\operatorname{rot} \operatorname{rot}$ в (9.8) вынесен за знак интеграла, поскольку точка наблюдения не принадлежит области интегрирования; $\hat{\beta}$ — структурный фактор:

$$\begin{aligned} \hat{\beta} &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2, \\ (\hat{\beta}_0)_{ij} &= \left(\int dV' - \frac{1}{N} \sum \right) \frac{3n_i n_j - \delta_{ij}}{R^3} \exp(i k_0 R) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \\ (\hat{\beta}_1)_{ij} &= -ik_0 \left(\int dV' - \frac{1}{N} \sum \right) \frac{3n_i n_j - \delta_{ij}}{R^2} \exp(i k_0 R) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \\ (\hat{\beta}_2)_{ij} &= -k_0^2 \left(\int dV' - \frac{1}{N} \sum \right) \frac{n_i n_j - \delta_{ij}}{R} \exp(i k_0 R) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \end{aligned} \quad (9.9)$$

$i, j = x, y, z$, $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, \mathbf{k} — волновой вектор в объеме среды,

$$\mathbf{k} = (k_{Ix}, 0, k_z), \quad k_z = -k_0 \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_I}.$$

Используя (9.5), (9.8), уравнение (9.2) для напряженности поля в произвольном приповерхностном слое можно записать в следующем виде [58]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_I &= \mathbf{E}_{II} + i2\pi \frac{N\alpha}{k_{Iz}} \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{k}_I[\mathbf{k}_I \mathbf{E}_j]] (z_{j-1} - z_j) \times \\ &\times \exp[ik_{Iz}(z_l - z_j)] + i2\pi \frac{N\alpha}{k_{Iz}} \sum_{j=l+1}^L [\mathbf{k}_R[\mathbf{k}_R \mathbf{E}_j]] \times \\ &\times (z_{j-1} - z_j) \exp[ik_{Iz}(z_j - z_l)] + N\alpha \sum_{j=1}^L \hat{H}(z_l - z_j) \mathbf{E}_j + \\ &+ \frac{2\pi N\alpha}{k_{Iz}(k_{Iz} + k_z)} \exp(i \mathbf{k}_R \cdot \mathbf{r}_l) \exp[i(k_{Iz} + k_z)z_L] \times \\ &\times [\mathbf{k}_R[\mathbf{k}_R \mathbf{E}_{0v}]] + N\alpha \hat{\beta}(z_l) \mathbf{E}_{0v}, \end{aligned} \quad (9.10)$$

где $l = \overline{1, L}$,

$$\mathbf{E}_{II} = E_{0I} \exp \left[\frac{ik_{Iz}(z_{l-1} + z_l)}{2} \right],$$

\mathbf{E}_{0v} — амплитуда поля в объеме среды.

Таким образом, чтобы определить напряженность электромагнитного поля в произвольной точке наблю-

дения в приповерхностной области, необходимо знать амплитуду поля и показатель преломления в объеме среды.

9.2. Показатель преломления дискретно-непрерывного диэлектрика вдали от границы

Будем проводить разбиение на слои в глубь среды до тех пор, пока сфера Лорентца, проведенная вокруг произвольной точки, лежащей в объемной части среды, не перестанет захватывать возмущенную приповерхностную область. Поле в объемной части удовлетворяет уравнениям (9.6), (9.7). Используя доказанную в [23] математическую лемму и вычисляя интегралы по слоям, получим вместо (9.2) следующее равенство:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_v(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_I(\mathbf{r}) - 2\pi \frac{\alpha N}{k_{Iz}^2} \exp(i \mathbf{k}_I \cdot \mathbf{r}) \sum_{j=1}^L (\exp(-ik_{Iz} z_{j-1}) - \\ &- \exp(-ik_{Iz} z_j)) [\mathbf{k}_I[\mathbf{k}_I \mathbf{E}_j]] + \frac{4\pi}{3} \frac{n^2 + 2}{n^2 - 1} \mathbf{E}_v(\mathbf{r}) + \\ &+ N\alpha \operatorname{rot} \operatorname{rot} \int_{\Sigma_L} \left\{ \mathbf{E}_v \frac{\partial G}{\partial v'} - G \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial v'} \right\} dS' + \\ &+ N\alpha \hat{\beta} \mathbf{E}_v(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (9.11)$$

Тензор $\hat{\beta}$ определяется выражениями (9.9), где интегралы вычисляются по замкнутой сфере. Как показывают численные расчеты для различных типов симметрии распределения диполей, компоненты тензора $\hat{\beta}$, вообще говоря, не обращаются в нуль. Таким образом, принятая в нашем рассмотрении концепция о дискретно-непрерывной среде открывает дополнительные возможности в исследовании атомных систем с помощью оптического излучения.

В уравнении (9.11) можно выделить две группы членов. Одна из этих групп образует локальное уравнение, которое позволяет определить показатель преломления во внутренних точках среды. В случае если тензор $\hat{\beta}$ можно представить в виде скаляра, из этой группы членов можно получить следующую формулу [22]:

$$n^2 = \frac{1 + (8\pi/3)N\alpha - N\alpha\hat{\beta}}{1 - (4\pi/3)N\alpha - N\alpha\hat{\beta}}. \quad (9.12)$$

Эта формула отличается от формулы Лорентца — Лоренца [18] наличием структурного фактора $\hat{\beta}$.

Остальные члены в (9.11) образуют нелокальное уравнение

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{0I} - 2\pi \frac{N\alpha}{k_{Iz}^2} \sum_{j=1}^L [\exp(-ik_{Iz} z_{j-1}) - \exp(-ik_{Iz} z_j)] [\mathbf{k}_I[\mathbf{k}_I \mathbf{E}_j]] - \\ - \frac{2\pi N\alpha}{k_{Iz}(k_{Iz} - k_z)} \exp[i(k_{Iz} - k_z)z_L] [\mathbf{k}_I[\mathbf{k}_I \mathbf{E}_{0v}]] = 0. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Это уравнение является аналогом теоремы погашения Эвальда — Озеена [18]. Отличие заключается в смысле показателя преломления, который в нашем рассмотрении определяется формулой (9.12), и в учете переходного слоя. Уравнения (9.7), (9.10) и (9.13) образуют замкнутую систему, позволяющую определить поведение поля вблизи поверхности и амплитуду поля во внутренних точках среды.

На рисунке 7 представлены результаты решения системы (9.7), (9.10), (9.13) для случая нормального

падения внешней волны на полубесконечную среду. Расчеты показывают, что при не слишком больших значениях произведения поляризуемости α на концентрацию N ($\alpha N < 0,15$) толщина переходного слоя определяется в основном размерами сферы Лоренца и составляет 1–2 постоянные решетки (рис. 7а). Таким образом, предположение об установлении поля в среде в пределах одного атомного слоя, сделанное в [55], в этом случае оправдано. Однако при $\alpha N > 0,17$ усиливается взаимодействие между соседними слоями атомов. Толщина переходного слоя в этом случае сильно зависит от параметра αN и быстро возрастает при устремлении этого параметра к $3/(4\pi)$ (рис. 7б). Этим значениям αN соответствуют показатели преломления $n > 3$. Такие большие значения показателя преломления могут достигаться вблизи резонансов, где, однако, существенным становится поглощение.

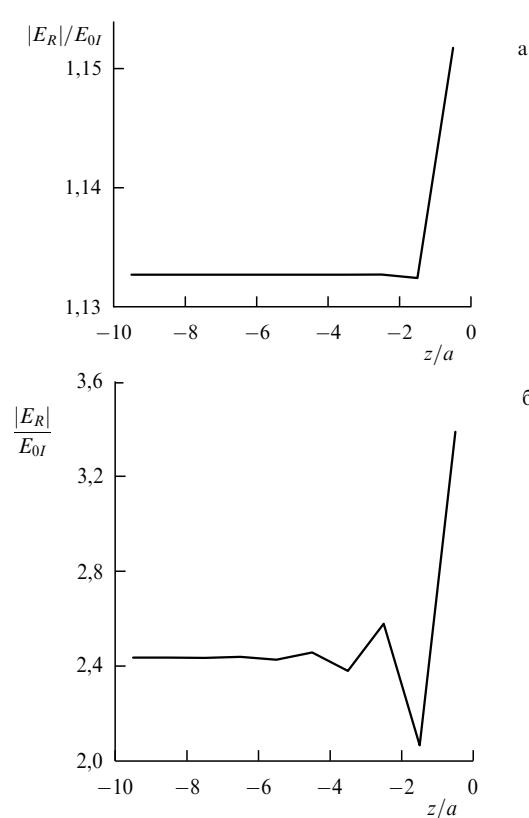


Рис. 7. Поведение амплитуды микроскопического поля $|E|$ в полубесконечном диэлектрике для случая нормального падения. Параметры, использованные в расчетах: $k_0a = 0,005$, где a — постоянная решетки; $N\alpha = 0,07$ (а); $N\alpha = 0,2$ (б).

9.3. Поле отраженной волны в волновой зоне

В работе [22] было вычислено поле отраженной волны в ближней зоне по отношению к поверхности дискретно-непрерывного диэлектрика. Было показано, что отраженная волна существенно отличается от френелевской отраженной волны, т.е. той волны, которая подчиняется френелевской формуле, справедливой для непрерывной среды. Такое отклонение от закона Френеля мы рассматривали в [22] как одно из проявлений эффекта ближнего

поля. Рассмотрим теперь поле отраженной волны вдали от поверхности, учитывая описанные выше свойства переходного слоя, обусловленные эффектом ближнего поля. Для точек наблюдения вне среды в соответствии с уравнением (9.2) поле отраженной волны \mathbf{E}_R представляется следующим образом:

$$\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^L \text{rot rot} \int_{V_j} \frac{1}{R} \mathbf{P}_j \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV' + \\ + \text{rot rot} \int_V \frac{1}{R} \mathbf{P}_v \left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c} \right) dV'. \quad (9.14)$$

Оператор rot rot вынесен за знак интеграла, поскольку точка наблюдения не принадлежит области интегрирования. Вычислив объемные интегралы для каждого поверхностного слоя и для объема среды, получим следующую формулу:

$$\mathbf{E}_R = 2\pi \frac{N\alpha}{k_{Iz}^2} \exp(i\mathbf{k}_R \mathbf{r}) \sum_{j=1}^L (\exp(ik_{Iz}z_{j-1}) - \\ - \exp(ik_{Iz}z_j)) [\mathbf{k}_R [\mathbf{k}_R \mathbf{E}_j]] + \frac{2\pi N\alpha}{k_{Iz}(k_{Iz} + k_z)} \exp(i\mathbf{k}_R \mathbf{r}) \times \\ \times \exp[i(k_{Iz} + k_z)z_L] [\mathbf{k}_R [\mathbf{k}_R \mathbf{E}_{0v}]]. \quad (9.15)$$

В результате неэкспоненциального поведения поля вблизи поверхности формула (9.15) будет давать несколько иные результаты, нежели обычные формулы Френеля. На рисунке 8 показано поведение амплитуды поля p -поляризованной волны вблизи угла Брюстера. Для сравнения на этом же рисунке представлены результаты расчетов по формулам Френеля и формулам работы [55]. Несмотря на то, что формула (9.15) дает для амплитуды поля отраженной волны при угле Брюстера ненулевое значение, оно на порядок меньше значения, получаемого с помощью формул работы [55], и почти на два порядка меньше значения, наблюдаемого в экспериментах [44]. Несоответствие между результа-

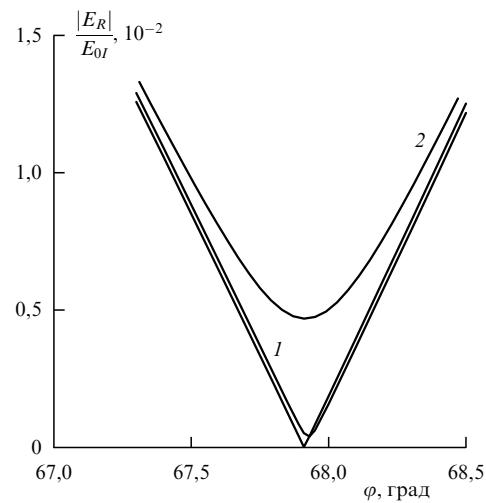


Рис. 8. Поведение амплитуды отраженной p -поляризованной волны вблизи угла Брюстера. Расчеты проведены на основе формулы (9.15) (кривая 1) и на основе формул работы [55] (кривая 2). Параметры, использованные в расчетах: $N\alpha = 0,15$; $k_0a = 0,005$, где a — постоянная решетки.

тами [55] и результатами теории, предлагаемой в статье [58], объясняется некоторой непоследовательностью теории [55]. А именно, в ней не учитывалось взаимное влияние атомов из соседних слоев друг на друга.

Основываясь на полученных результатах, можно говорить о том, что для материалов с показателем преломления $n < 2,5$ эффект ближнего поля дает все же значительно меньший вклад в образование переходного слоя по сравнению с другими механизмами [44].

10. Оптическое зондирование электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды

В последние годы значительный интерес вызывают оптические явления вблизи поверхности различных сред на расстояниях много меньше длины волн излучения (в ближней зоне). С чисто фундаментальной точки зрения ближняя зона интересна тем, что в ней происходит процесс постепенного формирования отраженных и прошедших волн, и их поведение существенно отличается от того, что наблюдается в дальней зоне.

С другой стороны, в последние годы бурно развивается такое прикладное направление исследований, как сканирующая ближнепольная оптическая микроскопия [59–64]. Были разработаны и продолжают разрабатываться различные схемы оптических ближнепольных микроскопов, однако общим для них является то, что измерение оптического отклика среды на внешнее воздействие в них производится в ближней зоне. Поэтому исследования поведения электромагнитного поля вблизи поверхности имеют как фундаментальное, так и прикладное значение.

В настоящее время максимальное разрешение, которое позволяют получить ближнепольные оптические микроскопы, составляет величину порядка нескольких нанометров. При этом сканирование поверхности производится на расстоянии также порядка нескольких нанометров. Покажем, что особенности поведения электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды позволяют исследовать структуру поверхности вплоть до атомарного уровня.

Математический формализм, используемый в данной работе, основан на использовании интегро-дифференциальных уравнений для напряженности микроскопического поля (см. уравнение (6.3)). При этом будет учтена дискретная структура диэлектрической среды. Выше было показано, что оптические свойства поверхности даже в отсутствие структурных изменений могут существенно отличаться от оптических свойств объемных слоев диэлектриков. Однако многие интересные аспекты поведения электромагнитного поля в ближней зоне не были исследованы в полной мере. Ниже будет решена граничная задача линейной классической оптики взаимодействия электромагнитной волны со сверхтонкой диэлектрической пленкой. Будет показано, что все выводы о характере поведения поля вблизи поверхности сверхтонкой пленки останутся справедливыми и для диэлектрических сред произвольной толщины.

Пусть монохроматическая световая волна с частотой ω и вектором напряженности электрического поля $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ падает на диэлектрическую пленку толщины h . Над пленкой расположен зонд, который производит измерение электромагнитного поля в

некоторой точке пространства (рис. 9). Зонд будем рассматривать как одиночный диполь с линейной поляризацией α_p . Такую схему эксперимента, в которой роль зонда выполняет одиночный атом, можно реализовать практически, если, например, использовать атом в магнито-оптической ловушке [65]. Нашей целью является вычисление интенсивности электромагнитного поля на зонде при перемещении (сканировании) его вдоль поверхности пленки на некотором заданном расстоянии z .

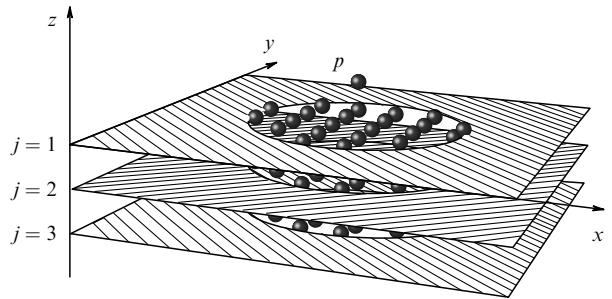


Рис. 9. Модель диэлектрической пленки, позволяющая учесть ее дискретную структуру. Точка наблюдения \mathbf{r} , которая находится в месте расположения атома, выполняющего роль измерительного зонда (p), окружена цилиндром радиуса ε и образующей, перпендикулярной поверхности пленки. При этом атомы внутри цилиндра рассматриваются как дискретно распределенные диполи, а часть пленки за пределами цилиндра рассматривается как набор непрерывных монослоев. Для примера на рисунке изображен случай $N = 3$.

Для того чтобы учесть дискретную структуру пленки, рассмотрим следующую модель. Представим диэлектрическую пленку как систему N монослоев, находящихся на расстоянии a_0 друг от друга, где a_0 — постоянная решетки (см. рис. 9). Рассмотрим ситуацию, когда атомы пленки образуют идеальную кристаллическую структуру с кубической симметрией (однако предлагаемый подход легко допускает обобщение и на другие типы симметрии). Окружим точку наблюдения, которая может находиться как в месте расположения зонда, так и в месте расположения некоторого атома пленки, цилиндром радиуса $\varepsilon > a_0$. Ось цилиндра проходит через точку наблюдения параллельно координатной оси z . При этом атомы, находящиеся внутри цилиндра, будем рассматривать как диполи с дискретным распределением, а атомы, находящиеся вне цилиндра, будем рассматривать как систему параллельных непрерывных атомных монослоев. При перемещении точки наблюдения в плоскости (x, y) цилиндр смещается как целое. Пользуясь такой моделью диэлектрической пленки и рассматривая стационарный случай, интегро-дифференциальное уравнение для напряженности локального электрического поля на зонде $\mathbf{E}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ можем записать в виде (6.4) (см. [66])

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = & \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) + \frac{\alpha}{a_0^2} \sum_{j=1}^N \int_{\sigma}^{\Gamma_{\infty}} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j(x', y') G(R_j) dS' + \\ & + \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j(x_a, y_a) G(R_{a_j}), \end{aligned} \quad (10.1)$$

где $\mathbf{r} = (x, y, z)$ — радиус-вектор местоположения зонда; α — микроскопическая поляризумость атомов пленки, которая, как предполагается, не зависит от поля; $G(R) = \exp(i k_0 R)/R$ — функция Грина уравнения Гельмгольца; $k_0 = \omega/c$, $R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j|$, $\mathbf{r}'_j = (x', y', z_j)$, $R_{aj} = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{aj}|$, $\mathbf{r}_{aj} = (x_{aj}, y_{aj}, z_j)$.

Интегралы в уравнении (10.1) вычисляются по плоскости (x', y') , при этом круг σ с центром в точке наблюдения не включается в область интегрирования. Последний член в уравнении (10.1) учитывает атомы внутри цилиндра. Введены также следующие обозначения:

$$\mathbf{E}_j(x, y) = \mathbf{E}(x, y, z_j), \quad j = \overline{1, N}. \quad (10.2)$$

Пусть $\mathbf{r}_{al} = (x_{al}, y_{al}, z_l)$ — радиус-вектор некоторого атома l -го монослоя пленки. Тогда для локального поля на этом атоме будем иметь

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l(x_{al}, y_{al}) &= \mathbf{E}_{ll}(x_{al}, y_{al}) + \alpha_p \nabla_{\mathbf{r}_{al}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{al}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) G(R_{al}) + \\ &+ \frac{\alpha}{a_0^2} \sum_{j=1}^N \int_{\sigma}^{\Gamma_{\infty}} \nabla_{\mathbf{r}_{al}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{al}} \times \mathbf{E}_j(x', y') G(R_{alj}) dS' + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{aj} \nabla_{\mathbf{r}_{al}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{aj}} \times \mathbf{E}_j(x_a, y_a) G(R_{alaj}), \quad l = \overline{1, N}, \end{aligned} \quad (10.3)$$

где $\mathbf{E}_{ll}(x_{al}, y_{al}) = \mathbf{A}_l(\mathbf{r}_{al})$, $R_{al} = |\mathbf{r}_{al} - \mathbf{r}|$, $R_{alj} = |\mathbf{r}_{al} - \mathbf{r}'_j|$, $R_{alaj} = |\mathbf{r}_{al} - \mathbf{r}_{aj}|$. Таким образом, поставленная нами задача сводится к самосогласованному решению системы уравнений (10.1), (10.3).

10.1. Поле на зонде при сканировании вдоль поверхности пленки

Чтобы обеспечить приемлемую точность вычислений при расчетах решеточных сумм в уравнениях (10.1), (10.3), размер области дискретности должен составлять значительную величину. Будем предполагать, что влияние зонда на распределение электромагнитного поля в пленке является незначительным на удалении его от поверхности, большем или равном постоянной решетки даже при достаточно больших поляризумостях α_p . Таким образом, второе слагаемое в правой части уравнения (10.3) можно опустить, при этом решение системы (10.1), (10.3) значительно упростится [23].

Пусть внешняя волна является плоской, т.е.

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_{0l} \exp(i k_0 \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{r}), \\ \mathbf{s}_l &= (\sin \theta_l \cos \Phi_l, \sin \theta_l \sin \Phi_l, -\cos \theta_l), \end{aligned} \quad (10.4)$$

где θ_l — угол падения, а азимутальный угол Φ_l определяет ориентацию плоскости падения относительно базисного вектора a_{0y} . В работе [23] был рассмотрен частный случай $\Phi_l = \pi$. Ниже мы получим решение задачи для произвольного Φ_l . Благодаря однородности поверхностей пленки решение для локального поля в среде можно записать в виде

$$\mathbf{E}_l(x, y) = \mathbf{E}_l \exp[i k_0 \sin \theta_l (\cos \Phi_l x + \sin \Phi_l y)]. \quad (10.5)$$

Подставляя (10.4), (10.5) в (10.3) и пользуясь методом, подробно изложенным в [23], получим для точек наблюдения в месте расположения атомов пленки следующую

систему уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l &= \mathbf{E}_{ll} - i 2 \pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{s}_l \times (\mathbf{s}_l \times \mathbf{E}_j)] \times \\ &\times \exp[i k_0 a_0 \cos \theta_l (z_j - z_l)] - i 2 \pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \times \\ &\times \sum_{j=l+1}^N [\mathbf{s}_R \times (\mathbf{s}_R \times \mathbf{E}_j)] \exp[i k_0 a_0 \cos \theta_l (z_l - z_j)] + \\ &+ C \sum_{j=1}^N \hat{\Pi}(z_l - z_j) \mathbf{E}_j, \quad l = \overline{1, N}, \end{aligned} \quad (10.6)$$

где

$$\mathbf{E}_{ll} = \mathbf{E}_{0l} \exp(-i k_0 \cos \theta_l z_l), \quad l = \overline{1, N}, \quad (10.7)$$

$C = \alpha/a_0^3$, \mathbf{s}_l задается формулой (10.4), вектор \mathbf{s}_R имеет вид

$$\mathbf{s}_R = (\sin \theta_l \cos \Phi_l, \sin \theta_l \sin \Phi_l, \cos \theta_l). \quad (10.8)$$

Явный вид тензора $\hat{\Pi}$ в силу его громоздкости приведен в приложении (пункт А).

После того как система уравнений (10.6) решена, можно вычислить поле на зонде, используя уравнение (10.1), которое перепишем в следующем виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{0R}(\mathbf{r}) \exp(i k_0 \mathbf{s}_R \cdot \mathbf{r}), \quad z > 0, \quad (10.9)$$

где амплитуда отраженной волны при учете дискретной структуры среды описывается формулой [23]

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{0R}(\mathbf{r}) &= -i 2 \pi C \frac{k_0 a_0}{\cos \theta_l} \sum_{j=1}^N [\mathbf{s}_R \times (\mathbf{s}_R \times \mathbf{E}_j)] \times \\ &\times \exp[-i k_0 a_0 \cos \theta_l z_j] + C \exp[-i k_0 a_0 \cos \theta_l z] \times \\ &\times \sum_{j=1}^N \hat{\Pi}(x, y, z - z_j) \mathbf{E}_j, \end{aligned} \quad (10.10)$$

где величины \mathbf{E}_j , $j = \overline{1, N}$, являются решениями системы (10.6).

В работе [23] рассматривались ситуации, когда при вычислении поля отраженной (прошедшей) волны точка наблюдения находится точно над (под) каким-либо атомом пленки. Здесь мы рассматриваем более общий случай произвольного расположения точки наблюдения в плоскости (x, y) .

Как видно из (10.10), в общем случае амплитуда отраженной волны является функцией координаты точки наблюдения \mathbf{r} . Указанная зависимость определяется слагаемыми в формуле (10.10), содержащими тензор $\hat{\Pi}$.

Зависимости величины $I = |\mathbf{E}|^2$, которая пропорциональна интенсивности электромагнитного поля на зонде, от координат x, y для случая s -поляризации падающей волны, т.е. когда

$$\mathbf{E}_{0l} = (\sin \Phi_l, -\cos \Phi_l, 0) E_{0l}, \quad (10.11)$$

приведены на рис. 10. Расстояние от поверхности пленки z выбрано равным одной постоянной решетки. Число монослоев — $N = 11$. Приведенные зависимости относятся к случаю нормального падения внешней волны ($\theta_l = 0$). В случае наклонного падения в поведении поля внутри и вне пленки наблюдаются некоторые особенности, связанные с учетом дискретного распределения атомов вблизи точки наблюдения и требующие специального рассмотрения.

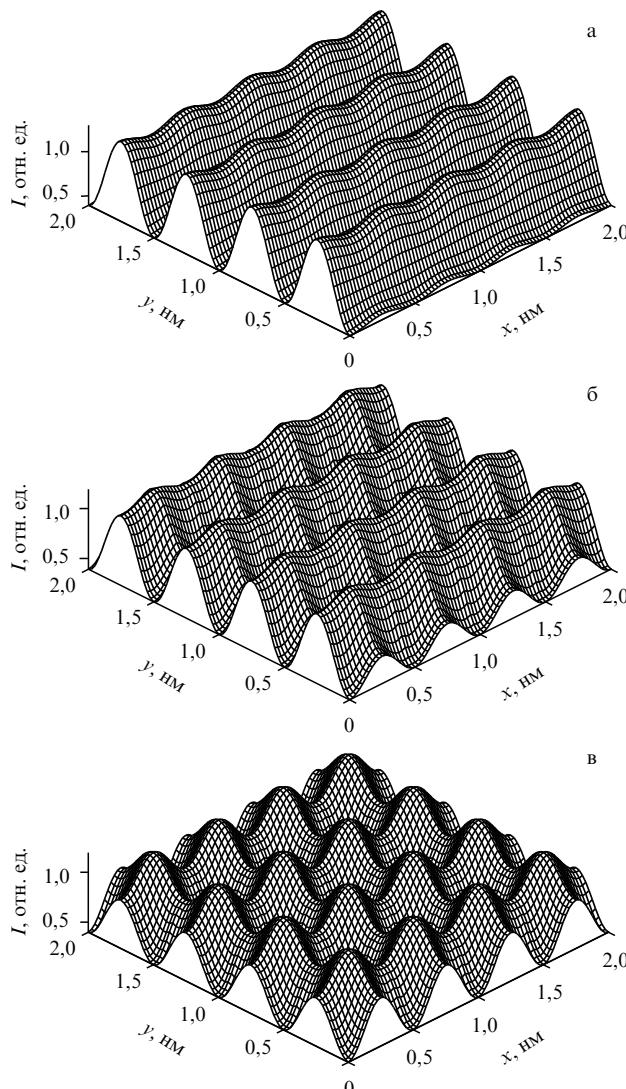


Рис. 10. Зависимости интенсивности электромагнитного поля на зонде от координат x и y . Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $N = 11$, $k_0 a_0 = 0,005$, $C = 0,2$, $a_0 = 0,5$ нм, $z = a_0$, $\theta_I = 0^\circ$; $\Phi_I = 0^\circ$ (а), $\Phi_I = 30^\circ$ (б), $\Phi_I = 45^\circ$ (в). Распределение интенсивности электромагнитного поля является периодической функцией координат x и y , причем период равен постоянной решетки a_0 . Местам расположения атомов пленки соответствуют минимумы интенсивности.

Как видно из приведенных зависимостей, интенсивность электромагнитного поля является периодической функцией координат x и y , причем период равен постоянной решетки a_0 . Таким образом, отраженная волна на малых расстояниях от поверхности не является плоской.

Местам расположения атомов поверхностного монослоя соответствуют минимумы интенсивности. Величина разности между максимумами и минимумами интенсивности сильно зависит от расстояния до поверхности пленки. При уменьшении расстояния разность увеличивается, а при увеличении — уменьшается. На расстояниях, больших $2a_0$, распределение интенсивности в плоскости (x, y) становится практически однородным, т.е. отраженная волна становится плоской. Это является следствием того факта, что на таких расстояниях в формуле (10.10) члены, содержащие тензор \hat{P} , перестают давать вклад. Из рисунка 10а также видно, что контрастность изображения в направлении, нормальном к вектору поляризации внешней волны, существенно ниже. Это находится в согласии с результатами, полученными в работе [62]. Однако при повороте плоскости поляризации Φ_I можно добиться существенного улучшения контрастности изображения (рис. 10в). Следует заметить, что независимо от угла поворота Φ_I интенсивность поля над атомами и над центром элементарной ячейки остается постоянной.

Еще одним важным аспектом в поведении электромагнитного поля вблизи поверхности является то, что поле отраженной волны вблизи поверхности всегда содержит три пространственные компоненты: E_{Rx} , E_{Ry} и E_{Rz} , даже если внешняя волна имеет только одну компоненту. Для иллюстрации на рис. 11 приведены зависимости интенсивностей x - и z -компонент электромагнитного поля ($I_x = |E_x|^2$, $I_z = |E_y|^2$) на зонде от координат x , y , когда внешняя волна поляризована вдоль оси y . Заметим, что в то время как полная интенсивность поля вблизи поверхности пленки осциллирует с периодом решетки, каждая из компонент I_x , I_z промодулирована с полуperiодом решетки; y -компоненты поля вблизи пленки не показаны, так как ее вид практически совпадает с формой распределения для полной интенсивности (см. рис. 10).

Если зонд располагается по другую сторону пленки ($z < -h$), поле на зонде определяется полем прошедшей волны. При этом все характерные черты поведения отраженной волны в ближней и волновой зонах остаются справедливыми и для прошедшей волны.

Таким образом, на малых расстояниях от поверхности пленки поля отраженной и прошедшей волн не являются плоскими волнами. Можно также утверждать,

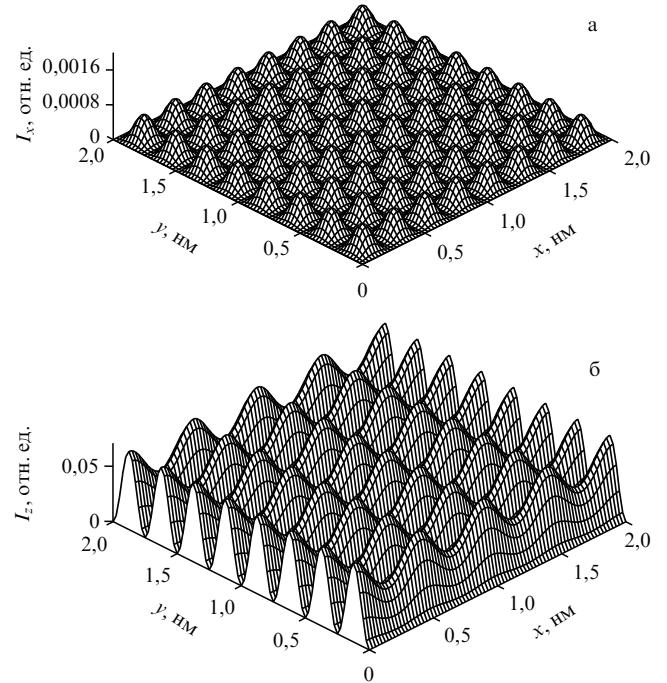


Рис. 11. Зависимости интенсивностей x -компонент (а) и z -компонент (б) электромагнитного поля ($I_x = |E_x|^2$, $I_z = |E_y|^2$) на зонде от координат x и y . Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $N = 11$, $k_0 a_0 = 0,005$, $C = 0,2$, $a_0 = 0,5$ нм, $z = a_0$, $\theta_I = 0^\circ$, $\Phi_I = 0^\circ$. Несмотря на то, что внешняя волна поляризована вдоль оси y , оптический отклик среды в ближней зоне содержит все три компоненты.

что формирование отраженной и преломленной волн происходит на расстояниях порядка постоянной решетки от поверхности среды.

Итак, решена граничная задача линейной классической оптики, в которой исследовано поведение электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды с учетом ее дискретной структуры [66]. Показано, что на расстоянии от поверхности меньше $2a_0$, где a_0 — постоянная решетки, поведение отраженной и прошедшей волн принципиально отличается от того, что имеет место в дальней зоне.

Обычно в литературе можно найти лишь рассуждения общего характера о том, что процесс формирования отраженной и прошедшей волн происходит в области с размерами меньше длины волны излучения, без каких-либо точных оценок (см., например, [44]). Наши расчеты показывают, что данный процесс происходит на расстоянии примерно $2a_0$ от поверхности.

Несмотря на то, что выше рассматривалась тонкая пленка диэлектрика, обнаруженные черты поведения поля вблизи поверхности имеют место и в случае протяженных сред. Действительно, поскольку поверхностные эффекты, о которых шла речь в статье, наблюдаются на расстояниях не более $2a_0$, становится понятным, что основную роль в их появлении играют только приповерхностные слои. Объемные слои могут давать лишь постоянный вклад, который в данном случае несуществен.

11. Оптика малых объектов и эффект ближнего поля

Малыми объектами будем называть небольшую группу атомов или молекул, которые занимают объем, линейные размеры которого значительно меньше длины световой волны. Примерами таких систем могут быть осажденные атомы на подложке, отдельные комплексы в твердых растворах или агрегаты, недавно обнаруженные экспериментально [67]. Теория линейных молекулярных агрегатов, взаимодействующих с полем квазирезонансной световой волны, рассматривалась в [67], где предполагалось, что поля на отдельных молекулах одинаковые. В работах [68, 69] рассматривалось взаимодействие малого объекта из двух атомов в поле квазирезонансного излучения. На основе совместной системы уравнений для полевых и атомных переменных было показано, что поля на отдельных атомах в области резонансных частот могут существенно различаться. При этом поле в волновой зоне, образованное малым объектом, заметно изменяется в зависимости от межатомного расстояния и ориентации оси малого объекта по отношению к направлению распространения внешней световой волны. Такое свойство полей внутри и вне малого объекта объясняется в работах [68, 69] проявлением эффекта ближнего поля.

11.1. Два атома в поле

слабой квазирезонансной плоской волны

Микроскопическое поле световой волны $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ в некоторой точке наблюдения \mathbf{r} в момент времени t определим с помощью следующего уравнения:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=1}^2 \text{rot rot} \frac{\mathbf{p}_j(t - R_j/c)}{R_j}, \quad (11.1)$$

где $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — напряженность электрического поля внешней световой волны, распространяющейся со скоростью света c ; \mathbf{p}_j — индуцированный дипольный момент j -го атома, который будем считать линейной функцией поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t - R_j/c)$ в месте расположения j -го атома. Расстояние R_j равно $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$, где \mathbf{r}_j — радиус-вектор j -го атома относительно начала системы координат, помещенного в центре одного из атомов, например первого. Дифференцирование в (11.1) производится по координатам точки наблюдения. В частном случае, когда точка наблюдения находится в месте расположения одного из атомов, мы получим из (11.1) систему двух уравнений для неизвестных величин $\mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t)$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t)$. Определив эти величины, можно с помощью уравнений (11.1) найти поле и в других точках наблюдения.

Уравнение (11.1) необходимо дополнить уравнениями для атомных переменных. Будем рассматривать атомы как лоренцевские осцилляторы [24]. В этом случае вектор индуцированного дипольного момента \mathbf{p}_j примет вид

$$\mathbf{p}_j = e(\mathbf{u}_j - i\mathbf{v}_j) \exp(-i\omega t) + \text{к. с.}, \quad j = 1, 2, \quad (11.2)$$

где e — заряд электрона, ω — частота колебаний осциллятора. Величины \mathbf{u}_j и \mathbf{v}_j зависят от местоположения атома, а также зависят от времени, так как собственные частоты ω_1 и ω_2 атомов отличаются от частоты ω поля внешней световой волны. Однако величины \mathbf{u}_j и \mathbf{v}_j будут изменяться со временем медленно, если разности $\omega - \omega_1$ и $\omega - \omega_2$ малы. В этом случае справедливы следующие неравенства:

$$|\dot{\mathbf{u}}_j| \ll \omega |\mathbf{u}_j|, \quad |\ddot{\mathbf{u}}_j| \ll \omega^2 |\mathbf{u}_j|, \quad |\dot{\mathbf{v}}_j| \ll \omega |\mathbf{v}_j|, \quad |\ddot{\mathbf{v}}_j| \ll \omega^2 |\mathbf{v}_j|. \quad (11.3)$$

Эти условия позволяют представить уравнение движения j -го диполя

$$\ddot{\mathbf{p}}_j + \frac{2}{\tau_0} \dot{\mathbf{p}}_j + \omega_j^2 \mathbf{p}_j = \frac{e^2}{m} \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t) \quad (11.4)$$

(m — масса электрона, $1/\tau_0$ — относительная скорость затухания энергии изолированного диполя) с помощью следующего уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{u}_j - i\mathbf{v}_j) = \left(-i\Delta_j - \frac{1}{T} \right) (\mathbf{u}_j - i\mathbf{v}_j) + i\zeta_0 \mathbf{E}_{0j}, \quad (11.5)$$

где $\zeta_0 = e/(m\omega)$; \mathbf{E}_{0j} определим из выражения для поля

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_j) \exp(-i\omega t) + \text{к. с.} \quad (11.6)$$

как $\mathbf{E}_{0j} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_j)$. Здесь $1/T$ — полная скорость затухания осциллятора, которая может отличаться от скорости затухания изолированного осциллятора, $\Delta_j = \omega_j - \omega$ — отстройка от резонанса.

Уравнения (11.5) и (11.1) образуют замкнутую систему уравнений, где самосогласованным образом учтено взаимное влияние поля и атомов. При этом [1]

$$\begin{aligned} \text{rot rot} \frac{[\mathbf{p}_j]}{R_j} &= \frac{3([\mathbf{p}_j]\mathbf{n}_j - [\mathbf{p}_j])}{R_j^3} + \frac{3([\dot{\mathbf{p}}_j]\mathbf{n}_j - [\dot{\mathbf{p}}_j])}{cR_j^2} + \\ &+ \frac{([\ddot{\mathbf{p}}_j]\mathbf{n}_j - [\ddot{\mathbf{p}}_j])}{c^2 R_j}, \end{aligned} \quad (11.7)$$

где символ $[\dots]$ означает, что соответствующая величина определена в момент времени $t - R/c$, $\mathbf{n}_j = \mathbf{R}_j/R_j$. В

частном случае, когда точка наблюдения совпадает с местоположением одного из атомов, величина R_j представляет собой межатомное расстояние R . Первое слагаемое в (11.7) соответствует кулоновскому полю диполя, а остальные слагаемые соответствуют запаздывающему полу диполя в точке наблюдения \mathbf{r} . Поле (11.7) является поляризующим полем j -го диполя, которое по физическому смыслу отличается от рассеянного поля [17]. Ниже будет исследовано пространственное распределение кулоновского и запаздывающих поляризующих полей в различных точках наблюдения при самосогласованном взаимодействии двух диполей с использованием стационарного решения уравнения (11.5). Рассмотрим вначале электрическое поле световой волны внутри малого объекта.

Помещая начало координат в точку \mathbf{r}_1 , имеем $\mathbf{r}_1(0, 0, 0)$ и $\mathbf{r}_2(0, R, 0)$. При таком выборе системы координат для неизвестных значений полей $\mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{r}_2, t)$ в месте расположения каждого из атомов при $i \neq j$ получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i, t) + \frac{3[\vec{p}_j^y]\mathbf{y}_0 - [\mathbf{p}_j]}{R^3} + \frac{3[\vec{p}_j^y]\mathbf{y}_0 - [\mathbf{p}_j]}{cR^2} + \\ + \frac{[\vec{p}_j^y]\mathbf{y}_0 - [\mathbf{p}_j]}{c^2R}, \end{aligned} \quad (11.8)$$

где \mathbf{y}_0 — единичный вектор в направлении оси y .

Пусть внешнее поле имеет следующий вид:

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i, t) = \mathbf{E}_{0I} \exp[i(\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_i - \omega t)] + \text{к. с.}, \quad (11.9)$$

где \mathbf{E}_{0I} — постоянная амплитуда, \mathbf{k}_0 — волновой вектор, модуль которого равен $k_0 = \omega/c$. При этом индуцированные дипольные моменты и поле в точках \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 определяются выражениями (11.2) и (11.6), где $\mathbf{p}_{0j} = e(\mathbf{u}_j - i\mathbf{v}_j)$ и \mathbf{E}_{0j} являются комплексными величинами.

Подставляя (11.9), (11.2) и (11.6) в уравнение (11.1) и выделяя одинаково осциллирующие множители, получим в случае стационарного решения уравнения (11.5) равенство

$$\mathbf{p}_{0j} = \alpha_j \mathbf{E}_{0j}, \quad (11.10)$$

где

$$\alpha_j = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - 2i\omega/T} \quad (11.11)$$

— поляризуемость j -го атома [24].

Подставим (11.10) в систему уравнений (11.8) и после соответствующих преобразований получим следующие связанные уравнения:

$$\begin{aligned} p_{01}^y &= \alpha_1 \{ E_{0I}^y + 2Gp_{02}^y \exp(i\mathbf{k}_0 R) \}, \\ p_{02}^y &= \alpha_2 \{ E_{0I}^y \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) + 2Gp_{01}^y \exp(i\mathbf{k}_0 R) \}, \end{aligned} \quad (11.12)$$

$$\begin{aligned} p_{01}^\beta &= \alpha_1 \{ E_{0I}^\beta - Fp_{02}^\beta \exp(i\mathbf{k}_0 R) \}, \\ p_{02}^\beta &= \alpha_2 \{ E_{0I}^\beta \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) - Fp_{01}^\beta \exp(i\mathbf{k}_0 R) \}, \\ \beta &= x, z, \end{aligned} \quad (11.13)$$

где

$$G = \frac{1}{R^3} - i\frac{k_0}{R^2}, \quad F = G - \frac{k_0^2}{R}. \quad (11.14)$$

Системы алгебраических уравнений (11.12), (11.13) являются линейными, поэтому найти их решения можно любым из стандартных методов. В итоге приходим к таким формулам для неизвестных величин [69]:

$$\begin{aligned} p_{01}^y &= \alpha_1 \frac{1 + 2\alpha_2 G \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 - 4\alpha_1 \alpha_2 G^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^y, \\ p_{01}^\beta &= \alpha_1 \frac{1 - \alpha_2 F \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 - \alpha_1 \alpha_2 F^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^\beta, \\ p_{02}^y &= \alpha_2 \frac{\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) + 2\alpha_1 G \exp(i\mathbf{k}_0 R)}{1 - 4\alpha_1 \alpha_2 G^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^y, \\ p_{02}^\beta &= \alpha_2 \frac{\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) - \alpha_1 F \exp(i\mathbf{k}_0 R)}{1 - \alpha_1 \alpha_2 F^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^\beta. \end{aligned} \quad (11.15)$$

Соответствующие выражения для напряженностей полей легко найти, если воспользоваться формулой (11.10).

Таким образом, найдено решение самосогласованной задачи в случае, когда внешнее поле создается плоской волной с частотой ω .

Прежде чем выписывать формулы для поля на каждом из атомов, сделаем еще одно упрощение. Пусть собственные частоты атомов будут одинаковыми, т.е. $\omega_1 = \omega_2 = \omega_0$. Тогда $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, и с помощью формул (11.15) находим выражения для комплексных амплитуд поля на каждом из атомов, которые имеют такой вид:

$$\begin{aligned} E_{01}^y &= \frac{1 + 2\alpha G \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 - 4\alpha^2 G^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^y, \\ E_{01}^\beta &= \frac{1 - \alpha F \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 - \alpha^2 F^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^\beta, \\ E_{02}^y &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) + 2\alpha G \exp(i\mathbf{k}_0 R)}{1 - 4\alpha^2 G^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^y, \\ E_{02}^\beta &= \frac{\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{R}) - \alpha F \exp(i\mathbf{k}_0 R)}{1 - \alpha^2 F^2 \exp(i2k_0 R)} E_{0I}^\beta. \end{aligned} \quad (11.16)$$

Таким образом, из формул (11.16) видно, что поле в месте расположения атомов, вообще говоря, не совпадает с внешним полем. Все определяется величинами факторов αF и αG , которые зависят от частоты внешнего поля и расстояния между атомами. Поля (11.16) совпадают с внешним полем только в том случае, если каждый из указанных факторов намного меньше 1. Последнее условие может выполняться, когда либо расстояние между атомами достаточно большое, либо частота внешнего поля значительно отличается от резонансной частоты.

Связем комплексные амплитуды полей на каждом из атомов друг с другом. Это можно сделать следующим образом:

$$\mathbf{E}_{02} = (E_{01}^x \mathbf{x}_0 + E_{01}^z \mathbf{z}_0) \exp(i\mathbf{k}_r R) + E_{01}^y \exp(i\mathbf{k}_l R) \mathbf{y}_0, \quad (11.17)$$

где $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$ — орты системы координат,

$$k_r = \frac{\mathbf{k}_0 \mathbf{R}}{R} - \frac{i}{R} \ln \frac{1 - \alpha F \exp[i(k_0 R - \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 - \alpha F \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]},$$

$$k_l = \frac{\mathbf{k}_0 \mathbf{R}}{R} - \frac{i}{R} \ln \frac{1 + 2\alpha G \exp[i(k_0 R - \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}{1 + 2\alpha G \exp[i(k_0 R + \mathbf{k}_0 \mathbf{R})]}. \quad (11.18)$$

Выражение (11.17) при учете формулы (11.6) означает, что поле в системе — это суперпозиция двух волн: поперечной волны с волновым вектором \mathbf{k}_r и продольной волны с волновым вектором \mathbf{k}_l . Направление каждого из указанных векторов совпадает с направлением оси y .

Теперь с помощью формул (11.6) можно определить поле световой волны вне малого объекта. Подставим (11.6) в уравнение (11.1). В этом случае функция Грина $\exp(i k_0 R_j)/R_j$ связывает j -й диполь и точку наблюдения \mathbf{r} вне малого объекта. Ниже будет исследовано численно поле в волновой зоне, образованное малым объектом.

11.2. Два атома в поле интенсивной квазирезонансной плоской волны

Применим полевое уравнение (11.1) для описания оптических свойств малого объекта из двух резонансных атомов в поле интенсивной световой волны

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}_I E_{0I} \exp(-i[\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - \omega t]) + \text{к. с.},$$

где \mathbf{e}_I — единичный вещественный вектор поляризации, E_{0I} — амплитуда волны, ω и \mathbf{k}_0 — соответственно частота и волновой вектор плоской волны ($k_0 = \omega/c$). Тогда дипольный момент j -го атома определим следующим образом:

$$\mathbf{p}_j = \frac{1}{2} \mathbf{d}(u_j + iv_j) \exp(i\omega t) + \text{к. с.}, \quad (11.19)$$

где \mathbf{d} — матричный элемент дипольного момента перехода между двумя выбранными квантовыми состояниями. Величины u_j и v_j в (11.19) удовлетворяют следующим уравнениям [24]:

$$\begin{aligned} \dot{u}_j &= -(\omega_0 - \omega)v_j - \frac{2}{\hbar}(\mathbf{d}\mathbf{e}_j)E''_{0j}w_j - \frac{u_j}{T'_2}, \\ \dot{v}_j &= (\omega_0 - \omega)u_j + \frac{2}{\hbar}(\mathbf{d}\mathbf{e}_j)E'_{0j}w_j - \frac{v_j}{T'_2}, \end{aligned} \quad (11.20)$$

$$\dot{w}_j = \frac{2}{\hbar}(\mathbf{d}\mathbf{e}_j)(E''_{0j}u_j - E'_{0j}v_j) - \frac{(w_j - w_0)}{T_1},$$

где ω_0 — частота выбранного резонансного перехода в спектре атома, w_j — инверсия соответствующих квантовых состояний на j -м атоме, w_0 — начальное значение инверсии, T_1 и T'_2 — времена релаксации [24]. Величины E'_{0j} и E''_{0j} представляют собой действительную и мнимую части амплитуды электрического поля на j -м атоме:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j, t) = \mathbf{e}_j(E'_{0j} + iE''_{0j}) \exp(i\omega t) + \text{к. с.}, \quad (11.21)$$

\mathbf{e}_j — вещественный вектор поляризации поля на j -м атоме.

Таким образом, мы определили самосогласованную систему уравнений для полевых и атомных переменных.

Будем исследовать только установившиеся процессы, т.е. положим, что время, прошедшее с момента включения внешнего поля, $t \gg T_1, T'_2$, и поэтому $\dot{u}_j = \dot{v}_j = \dot{w}_j = 0$. Это ограничение позволяет, используя уравнения (11.20), выразить атомные переменные через полевые:

$$\begin{aligned} u_j &= -\frac{w_0 \chi_j T'_2 (E'_{0j}(\omega - \omega_0)T'_2 + E''_{0j})}{\Delta_j}, \\ v_j &= \frac{w_0 \chi_j T'_2 (E'_{0j} - E''_{0j}(\omega_0 - \omega)T'_2)}{\Delta_j}, \\ w_j &= \frac{w_0 (1 + (\omega_0 - \omega)^2 (T'_2)^2)}{\Delta_j}, \end{aligned} \quad (11.22)$$

где $\Delta_j = 1 + (\omega_0 - \omega)^2 (T'_2)^2 + T_1 T'_2 \chi_j^2 ((E'_{0j})^2 + (E''_{0j})^2)$, $\chi_j = 2\mathbf{d}\mathbf{e}_j/\hbar$.

Помещая начало координат в точку \mathbf{r}_1 , имеем $\mathbf{r}_1(0, 0, 0)$ и $\mathbf{r}_2(0, R, 0)$. Положим также, что волновой вектор \mathbf{k}_0 внешней волны направлен вдоль \mathbf{r}_2 , а векторы \mathbf{e}_I и \mathbf{e}_j параллельны вектору \mathbf{d} . Тогда получим следующие уравнения для полей в местах расположения атомов:

$$E'_{0j} + iE''_{0j} = E_{0I} \exp(-ik_0 r_j) + Ad(u_j + iv_j) \exp(-ik_0 R), \quad (11.23)$$

где

$$A = \frac{k_0^2}{R} + i \frac{k_0}{R^2} - \frac{1}{R^3},$$

d — модуль вектора дипольного момента перехода.

Таким образом, поскольку величины u_j и v_j выражаются через полевые переменные, мы имеем систему двух комплексных нелинейных алгебраических уравнений.

В случае слабых полей, определяемых неравенством

$$T_1 T'_2 \chi_j^2 |E_{0I}|^2 \ll 1, \quad (11.24)$$

система (11.23) переходит в линейную алгебраическую систему. Решения этой системы были подробно исследованы нами в работе [69]. В случае сильных полей выполняется обратное (11.24) неравенство и соответствующая система имеет единственное решение. Однако нас это решение интересовать не будет.

Положим, что поля таковы, что

$$T_1 T'_2 \chi^2 |E_{0I}|^2 \sim 1.$$

Будем также считать, что резонансная частота перехода —

$$\omega_0 = 2,9 \times 10^{15} \text{ с}^{-1},$$

времена релаксации —

$$T_1 = 10^{-3} \text{ с}, \quad T'_2 = 10^{-8} \text{ с}, \quad d = 1,3 \times 10^{-18} \text{ CGSE}.$$

Численно решая систему уравнений (11.23), получим зависимость комплексной амплитуды электрического поля на каждом из атомов от волнового числа k_0 при фиксированных значениях амплитуды внешнего поля и расстояния между атомами. При определенных значениях E_{0I} и R эта зависимость представляет собой многозначную функцию, т.е. конкретным значениям k_0 соответствует несколько значений амплитуды электрического поля на атомах или несколько состояний поля. Это явление известно как оптическая мультистабиль-

ность. Способ перехода системы в то или иное состояние зависит от того, в каких состояниях система находилась до этого, т.е. имеет место явление гистерезиса. Положим $R = 1$, тогда численное исследование решений системы показывает, что мультистабильность имеет место при внешних полях, определяемых неравенством

$$10^{-2} < |E_{0I}| < 1 \text{ CGSE}.$$

На рисунках 12а, б представлены законы дисперсии волн, возбуждаемых в двухатомном малом объекте.

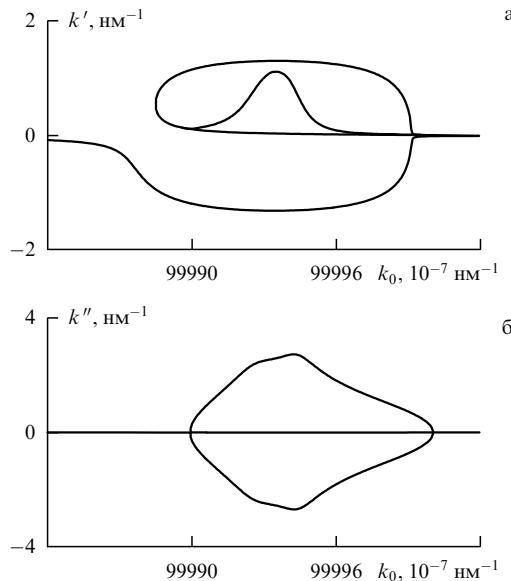


Рис. 12. Законы дисперсии действительной (а) и мнимой (б) частей волнового вектора \mathbf{k} . Расстояние между атомами — $R = 1,6 \text{ нм}$, напряженность внешнего поля — $E_{0I} = 0,5 \text{ CGSE}$.

11.3. Оптическая запись квантовой информации в двухкубитовом квантовом компьютере

Доказано, что квантовый компьютер может быть построен всего из двух элементов (вентиляй): однокубитового и двухкубитового элементов [70]. Известно, что единица квантовой информации — кубит — представляется как суперпозиция квантовых состояний некоторой системы $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, где $|0\rangle$, $|1\rangle$ — волновые функции двух состояний квантовой системы, α , β — комплексные числа, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ [71]. В работе [68] был предложен метод оптической записи квантовой информации в системе двух близко расположенных друг от друга ($R \ll \lambda$, λ — длина световой волны, R — расстояние между атомами) атомов, где квантовая информация измеряется с помощью инверсии w_1 и w_2 первого и второго атомов квантовой системы. Описание такой системы производилось с помощью уравнений (11.22), (11.1) при стационарном взаимодействии первого и второго атомов с полем интенсивного квазирезонансного излучения.

Решение задачи производилось в [68] численным путем при различных условиях возбуждения малого объекта. Так, было показано, что при равных частотах $\omega_{01} = \omega_{02}$ атомов инверсии атомов w_1 и w_2 также были одинаковыми при различных углах φ между вектором \mathbf{k}_0

и осью y , проходящей через первый и второй атомы. Было показано, что при $\omega_{01} = \omega_{02}$ и некоторых отстройках от резонанса возникает мультипольность, обусловленная неоднозначностью в определении инверсии атомов. На рисунке 13 представлены результаты численного расчета для инверсии атомов w_1 и w_2 для случая, когда первый и второй атомы имеют небольшие отличия по частотам. В этом случае инверсии атомов могут заметно различаться, что может быть использовано при записи квантовой информации на отдельных атомах в квантовом компьютере, представляющем собой малый объект.

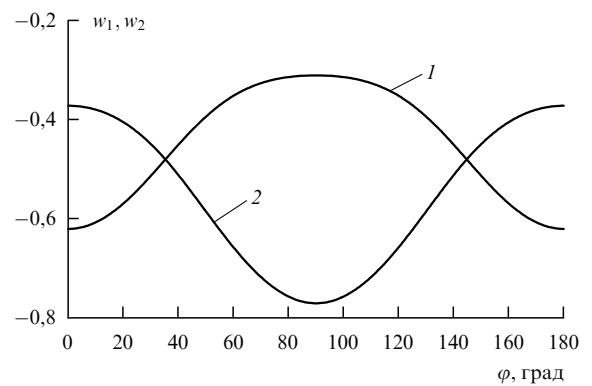


Рис. 13. Зависимость инверсии атомов малого объекта от угла между волновым вектором \mathbf{k}_0 внешней волны и осью, проходящей через первый и второй атомы малого объекта. Кривые 1 и 2 определяют инверсии w_1 и w_2 первого и второго атомов соответственно.

11.4. Оптическая голограмма малых объектов

Рассмотрим интерференцию поляризующих полей (11.1) от двух атомов малого объекта и опорного поля с волновым вектором \mathbf{k}'_0 (рис. 14) [72].

Вычислим поле в точках наблюдения \mathbf{r} в волновой зоне, в которой

$$k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| \gg 1, \quad k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2| \gg 1.$$

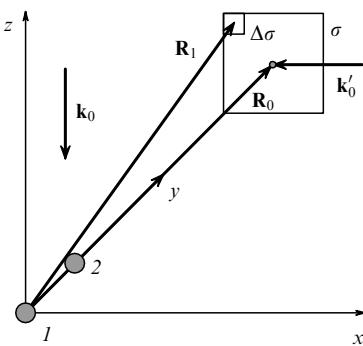


Рис. 14. Оптическая схема голографической записи малого объекта, состоящего из двух близко расположенных атомов. Плоскость голограммы находится на расстоянии R_0 от первого атома и совпадает с плоскостью xz ; \mathbf{k}_0 — волновой вектор предметного пучка, $\mathbf{k}'_0 \perp z$; $\Delta\sigma$ — элемент плоской голограммы, находящийся на расстоянии R_1 от первого атома, $R \ll \lambda$, $R_0 \gg \lambda$, λ — длина волны опорного и предметного излучения от одного источника.

В этих точках наблюдения основную роль играют члены, пропорциональные $1/R_j$ в (11.7). Тогда напряженности электрического и магнитного полей в точке наблюдения \mathbf{r} примут соответственно вид [8]

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}'_I(\mathbf{r}, t) - \frac{[\mathbf{n}_1 \times [\mathbf{n}_1 \times \ddot{\mathbf{p}}_1]]}{c^2 R_1} - \frac{[\mathbf{n}_2 \times [\mathbf{n}_2 \times \ddot{\mathbf{p}}_2]]}{c^2 R_2}, \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}'_I(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2 R_1} [\ddot{\mathbf{p}}_1 \times \mathbf{n}_1] + \frac{1}{c^2 R_2} [\ddot{\mathbf{p}}_2 \times \mathbf{n}_2],\end{aligned}\quad (11.25)$$

где \mathbf{E}'_I , \mathbf{H}'_I — напряженности соответственно электрического и магнитного полей опорной плоской волны с волновым вектором \mathbf{k}'_0 . Для плоской волны имеем [18]

$$\mathbf{H}'_I = \frac{1}{k'_0} [\mathbf{k}'_0 \times \mathbf{E}'_I],$$

где $k'_0 = k_0$. Индуцированные дипольные моменты первого и второго атомов малого объекта определены в формулах (11.19) в моменты времени $t - R_1/c$ и $t - R_2/c$, поэтому с учетом (11.15) получим следующие выражения:

$$\ddot{\mathbf{p}}_j^\gamma = -\omega^2 p_{0j}^\gamma \exp(i k_0 R_j) \exp(-i \omega t) + \text{к. с.}, \quad (11.26)$$

где индекс γ соответствует x -, y - или z -компонентам индуцированного дипольного момента j -го атома, $R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$.

Пусть $\Delta\sigma$ — некоторый элемент поверхности в окрестности точки наблюдения \mathbf{r} в плоскости голограммы. Тогда интенсивность оптического излучения в точке наблюдения определим по следующей формуле:

$$I(\mathbf{r}) = \Delta\sigma \cdot \frac{c}{4\pi} \cdot I_\sigma(\mathbf{r}), \quad I_\sigma(\mathbf{r}) = |[\mathbf{E} \times \mathbf{H}]_y|, \quad (11.27)$$

где величины \mathbf{E} , \mathbf{H} определены в точке \mathbf{r} согласно формулам (11.25). Меняя точку наблюдения, найдем распределение интенсивности интерферирующих полей в плоскости голограммы. Ниже будут приведены характерные голографические картины на основе формулы (11.27) при различных условиях.

В формулах (11.15) содержатся знаменатели, действительная часть которых может обращаться в нуль при изменении частоты ω внешнего излучения или относительного расстояния R . В этом случае амплитуды индуцированных дипольных моментов первого и второго атомов достигают своих максимальных значений. Как следует из (11.15), это наступает при следующих условиях:

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} \{ \alpha_1 \alpha_2 G^2 \exp(2ik_0 R) \} &= \frac{1}{4}, \\ \operatorname{Re} \{ \alpha_1 \alpha_2 F^2 \exp(2ik_0 R) \} &= 1,\end{aligned}\quad (11.28)$$

в зависимости от ориентации дипольных моментов относительно координатных осей.

Выделим в спектре первого и второго атомов малого объекта отдельные резонансы с волновыми числами k_{01} и k_{02} соответственно. Поляризумости α_1 и α_2 атомов согласно формуле (11.11) различаются. При этом $T_j = \gamma_{0j}^{-1}$, где $\gamma_{0j} = 2e^2 k_{0j}^2 / (3mc)$ ($j = 1, 2$). Пусть

$$k_{01} = 89000 \text{ см}^{-1}, \quad k_{02} = 92000 \text{ см}^{-1};$$

тогда

$$\gamma_{01} = 0,45 \times 10^8 \text{ с}^{-1}, \quad \gamma_{02} = 0,48 \times 10^8 \text{ с}^{-1}.$$

В случае точного резонанса

$$\operatorname{Re}(\alpha_1) = 1,8 \times 10^{-16} \text{ см}^3, \quad \operatorname{Re}(\alpha_2) = 1,6 \times 10^{-16} \text{ см}^3,$$

$$\operatorname{Im}(\alpha_1) = 3,6 \times 10^{-16} \text{ см}^3, \quad \operatorname{Im}(\alpha_2) = 3,2 \times 10^{-16} \text{ см}^3.$$

Таким образом, в отсутствие взаимодействия между атомами имеем два изолированных резонанса, соответствующих двум изотропным атомам.

Самосогласованное взаимодействие атомов малого объекта, определяемое решением (11.15), существенно изменяет спектроскопические свойства атомов. Численный анализ показывает, что малый объект размером $R = 1$ нм имеет четыре размерных резонанса при следующих значениях волновых чисел:

$$k'_{01} = 86992,9 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{02} = 93900,2 \text{ см}^{-1},$$

$$k'_{03} = 88326,3 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{04} = 92646,9 \text{ см}^{-1}.$$

Местоположение размерных резонансов на оси волновых чисел сильно зависит от межатомного расстояния и поляризумостей α_1 и α_2 изолированных атомов, из которых составлен малый объект. Первый и второй атомы малого объекта ведут себя как анизотропные частицы. Численные значения эффективных поляризумостей первого и второго атомов малого объекта в случае точных размерных резонансов существенно отличаются от резонансных значений α_1 и α_2 изолированных атомов. Более того, в области размерных резонансов

$$k'_{02} = 93900,2 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{03} = 88326,3 \text{ см}^{-1}$$

имеет место отрицательная дисперсия первого и второго атомов.

Исследуем некоторые свойства оптических голограмм, которые образуются в результате облучения двухатомного малого объекта когерентной предметной волной.

На рисунке 15 представлены результаты численного расчета интенсивности (11.27) плоской голограммы на расстоянии $R_0 = 100$ см от малого объекта. Частоты предметной и опорной волн одинаковы и соответствуют размерным резонансам. Относительное расстояние между атомами малого объекта — $R = 1$ нм. Фазовая плоскость опорной волны составляет угол $\alpha_0 = 0$ с плоскостью голограммы. Предметная и опорная волны линейно поляризованы. При этом векторы \mathbf{E}_{0I} и \mathbf{E}'_{0I} имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{E}_{0I}(E_{0I}, 0, 0), \quad \mathbf{E}'_{0I}(0, 0, E'_{0I}).$$

Угол θ между векторами \mathbf{k}_0 и \mathbf{R} равен 90° . Интенсивность поля в плоскости голограммы дана в единицах $\Delta\sigma(c/(4\pi))$, где $\Delta\sigma = \Delta x \cdot \Delta z$. Площадь голограммы равна $L_x L_y = 1 \text{ см}^2$. Как показывают численные расчеты, размерные резонансы являются узкими резонансами с шириной около $0,1 \text{ см}^{-1}$.

Проделаем четыре численных эксперимента, выбирая частоты опорной и предметной волн, соответствующие точным размерным резонансам с волновыми числами

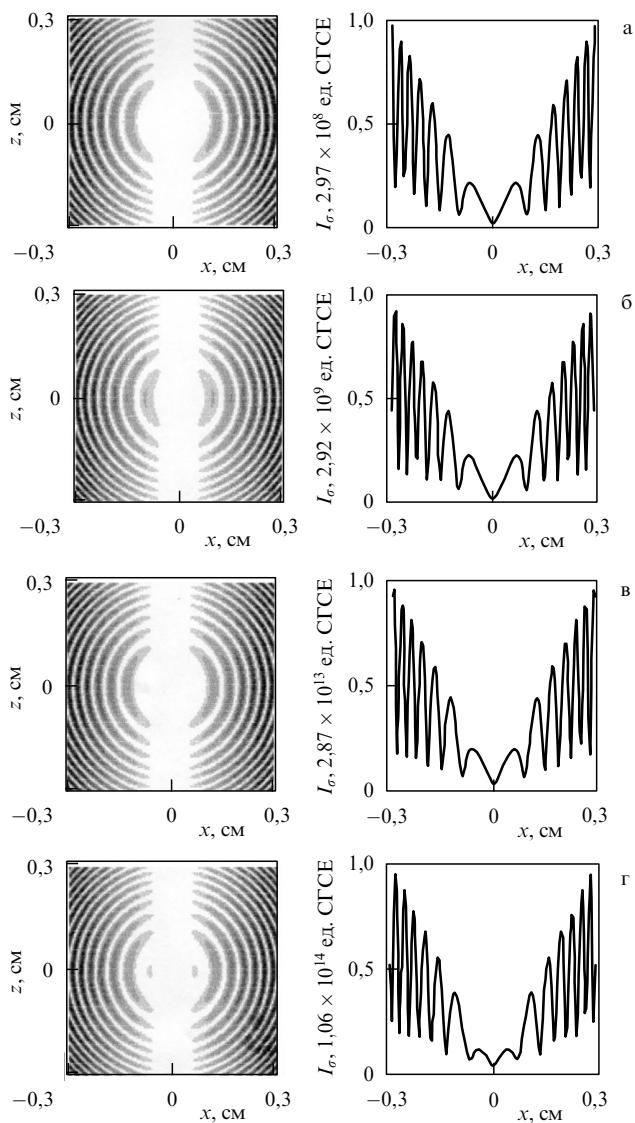


Рис. 15. Распределение интенсивности I_σ в плоскости голограммы xz от двухатомного наноструктурного объекта при нормальном падении предметной волны. При этом \vec{E}_{0l} имеет координаты $(0, E_{0l}^y, 0)$, $E_{0l}^y = 1$ ед. СГСЕ, расстояние R_0 от объекта до центра голограммы равно 100 см, волновой вектор \vec{k}_0 опорной волны имеет координаты $(0, 0, -k_0)$, $I_{\max} = (I_\sigma)_{\max}$ в единицах СГСЕ. Частоты предметной и опорной волн одинаковы и соответствуют четырем резонансам с волновыми числами: 86992,9 см⁻¹ (а), 93900,2 см⁻¹ (б), 88326,3 см⁻¹ (в), 92646,9 см⁻¹ (г). Атомы, из которых составлен наноструктурный объект, различные и имеют собственные частоты с волновыми числами 89000 см⁻¹ и 92000 см⁻¹. Расстояние между атомами в объекте равно 1 нм. Размер голограммы — $0,6 \times 0,6$ см².

$$k'_{01} = 86992,9 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{02} = 93900,2 \text{ см}^{-1},$$

$$k'_{03} = 88326,3 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{04} = 92646,9 \text{ см}^{-1}.$$

При этом размерные резонансы

$$k'_{01} = 86992,9 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{02} = 93900,2 \text{ см}^{-1}$$

выделяют y -составляющие индуцированных дипольных моментов первого и второго атомов малого объекта, поскольку x - и z -составляющие дипольных моментов при этих значениях обращаются в нуль. И наоборот, размерные резонансы

$$k'_{03} = 88326,3 \text{ см}^{-1}, \quad k'_{04} = 92646,9 \text{ см}^{-1}$$

выделяют x - и z -составляющие индуцированных дипольных моментов первого и второго атомов малого объекта. Таким образом, с помощью различных размерных резонансов можно исследовать индуцированную анизотропию наноструктурного объекта.

12. Заключение

Итак, в данном обзоре представлены уравнения распространения фотонов (5.11), (5.18) и уравнения распространения классических полей (6.1)–(6.3), (6.8), (6.16), (6.17), (6.30), (6.31), нелокальные в пространстве и во времени. В этих уравнениях учитывается влияние окружающих зарядов (электронов и атомных ядер) на протекание соответствующего процесса взаимодействия внешнего излучения с электроном, находящимся в некоторой точке наблюдения внутри системы.

Вывод нелокальных уравнений производится на основе квантовоэлектродинамического и полуклассического подходов. В рамках квантовоэлектродинамического подхода из всех эффектов 3-го порядка выделены те эффекты, которые сопровождаются обменом виртуальными фотонами между атомными электронами и излучением (поглощением) реального фотона. Фейнмановские диаграммы этих эффектов представлены на рис. 1. Доказано, что именно эти эффекты отвечают за формирование показателя преломления среды, т.е. за формирование в оптической среде волны, распространяющейся в среде с волновым вектором, отличающимся от волнового вектора волны в вакууме. Доказательство этого принципиального утверждения производится с помощью перехода в электрическом дипольном приближении от уравнения (5.11) к известному в классической оптике интегральному уравнению распространения электромагнитных волн в оптической среде, на основании которого в свою очередь с помощью процедуры Эвальда–Озеена удается строгим образом вывести формулу Лоренца–Лоренца для показателя преломления среды.

Эффекты 3-го порядка (см. рис. 1), как показано в разделе 5, могут быть представлены с помощью поляризующих полей, зависящих от типа промежуточных состояний и типа квантовых переходов в спектре взаимодействующих полей. Понятие поляризующих полей позволяет сделать следующие выводы.

Во-первых, в электрическом дипольном приближении электронное поляризующее поле представляет собой поле диполя, которое рассматривается как поле виртуальных фотонов. Это поле в системе двух атомов носит нелокальный характер. Возбуждение диполя одного из атомов происходит под действием внешнего поля в месте расположения этого атома, а квантовый переход с излучением (поглощением) реального фотона происходит в месте расположения другого атома.

Во-вторых, в зависимости от типа квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов могут быть получены различные уравнения распространения фотонов, которые в непрерывной среде могут быть представлены как нелокальные интегральные уравнения.

В данном обзоре решены некоторые типовые граничные задачи для того, чтобы показать преимущества полученных нелокальных уравнений по сравнению с локальными уравнениями Максвелла. При этом теоретически доказано существование в оптике диэлектриков

эффекта ближнего поля. Существование этого эффекта приводит к концепции дискретно-непрерывного диэлектрика, в котором необходимо учитывать структурный фактор. Роль этого структурного фактора наиболее значительная в приповерхностной области диэлектрика, в сверхтонких пленках, а также в малых объектах, линейные размеры которых значительно меньше длины световой волны. Можно утверждать также, что эффект ближнего поля является более общим понятием, чем эффект локального поля [26]. Эффект локального поля предсказывается теоретически в нелинейных резонансных оптических явлениях при переходе от микроскопического поля к макроскопическому с помощью соотношения (8.2) в модифицированных уравнениях Блоха [24]. Эффект ближнего поля учитывает дополнительно структурный фактор, а также соотношение (8.12), если рассматривать оптическое явление, например, в сверхтонкой пленке резонансных атомов [73].

Особый интерес с точки зрения применения нелокальных уравнений представляют так называемые малые объекты, линейные размеры которых значительно меньше длины световой волны. В данном обзоре рассмотрены две задачи, в которых рассматриваются малые объекты из двух резонансных атомов в поле слабого и интенсивного квазирезонансного излучения. Решения этих задач позволяют сделать важные выводы о возможности применения оптического излучения для исследования малых объектов, получения оптических голограмм этих объектов в зависимости от процессов, происходящих внутри малого объекта, а также применения малых объектов как составных частей квантового компьютера.

Автор выражает признательность К.А. Валиеву, Л.А. Шелепину, А.Н. Ораевскому за полезные обсуждения ряда принципиальных результатов данного обзора.

13. Приложение

А. Тензор $\widehat{\Pi}$ описывается следующими довольно громоздкими выражениями:

$$\widehat{\Pi}(x, y, z) = a_0 [\widehat{\mathcal{L}}(z) + \widehat{T}(z)] + \widehat{S}(x, y, z),$$

$$\widehat{\Pi}(0) = a_0 \widehat{J} + \widehat{S}(0),$$

$$\widehat{\mathcal{L}}(z) = \widehat{\Phi}^{-1} \widehat{\mathcal{L}}'(z) \widehat{\Phi}, \quad z \neq 0,$$

где матрица поворота $\widehat{\Phi}$ имеет следующий вид:

$$\widehat{\Phi} = \begin{pmatrix} -\cos \Phi_I & -\sin \Phi_I & 0 \\ \sin \Phi_I & -\cos \Phi_I & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Обратная матрица $\widehat{\Phi}^{-1}$ получается заменой $\Phi_I \rightarrow -\Phi_I$. Симметричный тензор третьего ранга $\widehat{\mathcal{L}}'(z)$ имеет следующие компоненты:

$$\mathcal{L}'_{xy}(z) = \mathcal{L}'_{zy}(z) = 0,$$

$$\mathcal{L}'_{xx}(z) = -2\pi \exp(i k_0 \sqrt{\varepsilon^2 + z^2}) \frac{\varepsilon^2}{(\varepsilon^2 + z^2)^{3/2}} \frac{1 - ik_0 \sqrt{\varepsilon^2 + z^2}}{\xi} J_1(\xi),$$

$$\mathcal{L}'_{yy}(z) = 2\pi \exp(i k_0 \sqrt{\varepsilon^2 + z^2}) \times \\ \times \left\{ \frac{\xi J_1(\xi)}{\sqrt{\varepsilon^2 + z^2}} - \frac{\varepsilon^2}{(\varepsilon^2 + z^2)^{3/2}} \left[J_0(\xi) - \frac{J_1(\xi)}{\xi} \right] \right\},$$

$$\mathcal{L}'_{zz}(z) = \mathcal{L}'_{xx}(z) + \mathcal{L}'_{yy}(z),$$

$$\mathcal{L}'_{zx}(z) = 2\pi \exp(i k_0 \sqrt{\varepsilon^2 + z^2}) i e z \frac{1 - ik_0 \sqrt{\varepsilon^2 + z^2}}{(\varepsilon^2 + z^2)^{3/2}} J_1(\xi),$$

где $\xi = k_0 \varepsilon \sin \theta_I$, J_n — функция Бесселя n -го порядка.

Тензор $T(z)$ определяется уравнением

$$\widehat{T}(z) = \widehat{\Phi}^{-1} \widehat{T}'(z) \widehat{\Phi},$$

где $\widehat{T}'(z)$ — симметричный тензор третьего ранга,

$$T'_{xy}(z) = T'_{yx}(z) = 0,$$

$$T'_{xx}(z) = 2\pi \int_0^\varepsilon J_0(k_0 \rho \sin \theta_I) G(R) \times \\ \times \left[\left(\frac{z}{R} \right)^2 \left(-k_0^2 - i \frac{3k_0}{R} + \frac{3}{R^2} \right) + \left(ik_0 - \frac{1}{R} \right) \frac{1}{R} \right] \rho d\rho,$$

$$T'_{zz}(z) = -2\pi k_0^2 \sin^2 \theta_I \int_0^\varepsilon J_0(k_0 \rho \sin \theta_I) G(R) \rho d\rho,$$

$$T'_{yy}(z) = T'_{xx}(z) + T'_{zz}(z),$$

$$T'_{xz}(z) = 2\pi i k_0 z \sin \theta_I \times \\ \times \int_0^\varepsilon J_0(k_0 \rho \sin \theta_I) G(R) \left(ik_0 - \frac{1}{R} \right) \frac{\rho}{R} d\rho,$$

$$R = \sqrt{\rho^2 + z^2}.$$

В отличие от тензоров $\widehat{\mathcal{L}}$ и \widehat{T} , которые являются функциями только координаты z , тензор \widehat{S} зависит также и от координат точки наблюдения в плоскости (x, y) :

$$\widehat{S}(x, y, z) = \begin{pmatrix} S_{xx}(x, y, z) & S_{yx}(x, y, z) & S_{zx}(x, y, z) \\ S_{xy}(x, y, z) & S_{yy}(x, y, z) & S_{zy}(x, y, z) \\ S_{xz}(x, y, z) & S_{yz}(x, y, z) & S_{zz}(x, y, z) \end{pmatrix},$$

$$S_{kl}(x, y, z) = a_0^3 \sum_{a_j} G(R_{a_j}) \times \\ \times \exp[-ik_0 R_{a_j} \sin \theta_I (\cos \Phi_I n_{a_j x} + \sin \Phi_I n_{a_j y})] \times \\ \times \left[k_0^2 (\delta_{kl} - n_{a_j k} n_{a_j l}) - ik_0 \frac{3n_{a_j k} n_{a_j l} - \delta_{kl}}{R_{a_j}} + \frac{3n_{a_j k} n_{a_j l} - \delta_{kl}}{R_{a_j}^2} \right],$$

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

$$n_{a_j x} = \frac{x - x_{a_j}}{R_{a_j}}, \quad n_{a_j y} = \frac{y - y_{a_j}}{R_{a_j}}, \quad n_{a_j z} = \frac{z}{R_{a_j}},$$

δ_{kl} — символ Кронекера. Суммирование распространяется на атомы j -го слоя, лежащие в пределах окружности радиуса ε с центром в точке наблюдения.

Тензор \widehat{S} обладает трансляционной симметрией:

$$\widehat{S}(x + a_{0x}, y, z) = \widehat{S}(x + a_{0x}, y + a_{0y}, z) = \\ = \widehat{S}(x, y + a_{0y}, z) = \widehat{S}(x, y, z),$$

где a_{0x} , a_{0y} — постоянные кристаллической решетки в направлениях x и y соответственно. Расчеты, приведенные в данной статье, относятся к случаю $a_{0x} = a_{0y} = a_0$.

Тензор \widehat{J} имеет вид

$$\widehat{J} = \widehat{\Phi}^{-1} \widehat{J}' \widehat{\Phi};$$

\widehat{J}' — диагональный тензор с компонентами

$$J'_{xx} = 2\pi \frac{\exp(i k_0 \varepsilon)}{\varepsilon} \left[J_0(\xi) + \frac{J_1(\xi)}{\xi} (ik_0 \varepsilon - 1) \right] + 2\pi k_0 \sin^2 \theta_I \left[k_0 \int_0^\varepsilon \exp(ik_0 \rho) \frac{J_1(a)}{a} d\rho - \frac{i}{1 + \cos \theta_I} \right],$$

$$J'_{yy} = 2\pi \frac{\exp(i k_0 \varepsilon)}{\varepsilon} (1 - ik_0 \varepsilon) \frac{J_1(\xi)}{\xi} + 2\pi k_0 \left[\frac{i}{\cos \theta_I} - k_0 \int_0^\varepsilon \exp(ik_0 \rho) J_0(a) d\rho \right],$$

$$J'_{zz} = -2\pi \frac{\exp(i k_0 \varepsilon)}{\varepsilon} J_0(\xi) + 2\pi k_0 \left[\frac{i}{\cos \theta_I} - k_0 \int_0^\varepsilon \exp(ik_0 \rho) J_0(a) d\rho \right] - 2\pi k_0 \sin^2 \theta_I \left[k_0 \int_0^\varepsilon \exp(ik_0 \rho) \frac{J_1(a)}{a} d\rho - \frac{i}{1 + \cos \theta_I} \right],$$

где $\xi = k_0 \varepsilon \sin \theta_I$, $a = k_0 \rho \sin \theta_I$.

Б. Тензор $\widehat{\Pi}$, фигурирующий в формулах (9.5) и (9.10), определяется следующими выражениями:

$$\widehat{\Pi}(z) = (z_{j-1} - z_j) [\widehat{\mathcal{L}}(z) + \widehat{T}(z)] + \widehat{S}(z), \quad z \neq 0, \\ \widehat{\Pi}(0) = (z_{j-1} - z_j) \widehat{J} + \widehat{S}(0), \quad z = 0.$$

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

$$\mathcal{L}_{xy}(z) = \mathcal{L}_{zy}(z) = 0,$$

$$\mathcal{L}_{xx}(z) = -2\pi \exp(ik_0 L_0) (L_0^2 - z^2) \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} \frac{J_1(\xi)}{\xi}, \\ \mathcal{L}_{yy}(z) = 2\pi \exp(ik_0 L_0) \left\{ \frac{\xi J_1(\xi)}{L_0} - (L_0^2 - z^2) \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} \times \right. \\ \left. \times \left[J_0(\xi) - \frac{J_1(\xi)}{\xi} \right] \right\},$$

$$\mathcal{L}_{zz}(z) = \mathcal{L}_{xx}(z) + \mathcal{L}_{yy}(z),$$

$$\mathcal{L}_{zx}(z) = 2\pi \exp(ik_0 L_0) iz \sqrt{L_0^2 - z^2} \frac{1 - ik_0 L_0}{L_0^3} J_1(\xi),$$

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

$\widehat{T}(z)$ — симметричный тензор третьего ранга:

$$T_{xy}(z) = T_{xy}(z) = 0,$$

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

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

$$T_{yy}(z) = T_{xx}(z) + T_{zz}(z),$$

$$T_{xz}(z) = 2\pi ik_0 z \sin \theta_I \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} J_0(k_0 \rho \sin \theta_I) G(R) \times \\ \times \left(ik_0 - \frac{1}{R} \right) \frac{\rho}{R} d\rho,$$

где $R = \sqrt{\rho^2 + z^2}$.

\widehat{S} — симметричный тензор с компонентами

$$S_{kl}(z) = \frac{1}{N} \sum_{a_j} G(R_{a_j}) \exp [-ik_{Ix}(x - x_{a_j})] \times \\ \times \left[k_0^2 (\delta_{kl} - n_{ajk} n_{ajl}) - ik_0 \frac{3n_{ajk} n_{ajl} - \delta_{kl}}{R_{a_j}} + \right. \\ \left. + \frac{3n_{ajk} n_{ajl} - \delta_{kl}}{R_{a_j}^2} \right],$$

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

δ_{kl} — символ Кронекера. Суммирование распространяется на атомы j -го слоя, лежащие в пределах окружности радиуса $(L_0^2 - z^2)^{1/2}$.

\widehat{J} — диагональный тензор с компонентами

$$J_{xx} = 2\pi \frac{\exp(ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2})}{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \times \\ \times \left[J_0(\xi) + \frac{J_1(\xi)}{\xi} (ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2} - 1) \right] + 2\pi k_0 \sin^2 \theta_I \times \\ \times \left[k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) \frac{J_1(a)}{a} d\rho - \frac{i}{1 + \cos \theta_I} \right],$$

$$J_{yy} = 2\pi \frac{\exp(ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2})}{\sqrt{L_0^2 - z^2}} (1 - ik_0 \sqrt{L_0^2 - z^2}) \frac{J_1(\xi)}{\xi} + \\ + 2\pi k_0 \left[\frac{i}{\cos \theta_I} - k_0 \int_0^{\sqrt{L_0^2 - z^2}} \exp(ik_0 \rho) J_0(a) d\rho \right],$$

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

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

Список литературы

- Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963)
- Давыдов А С *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963)
- Борн М, Хуан Кунь *Динамическая теория кристаллических решеток* (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 эхо-спектроскопия поверхности* (Минск: Навука и тэхника, 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 2-е изд.* (М.: Физматгиз, 1959)
12. Breit 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, Алтунин 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 et al. *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 Харкэ Э *Опм. 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 *Опм. и спектр.* **87** 1017 (1999)
35. Cook R J, Milonni P W *Phys. Rev. A* **35** 5081 (1987)
36. Parkins A S, Gardiner C W *Phys. Rev. A* **40** 3796 (1989)
37. Nordlander P, Tully J C *Phys. Rev. B* **42** 5564 (1990)
38. Hinds E A, Sandoghdar V *Phys. Rev. A* **43** 398 (1991)
39. Chen H *J. Chem. Phys.* **87** 1355 (1987)
40. Barut A O, Dowling J D *Phys. Rev. A* **36** 2550 (1987)
41. Belov A A, Lozovik Yu E, Pokrovsky V L *J. Phys. B* **22** L101 (1989)
42. Гадомский О Н, Крутицкий К В *ЖЭТФ* **106** 936 (1996)
43. Киттель Ч *Введение в физику твердого тела* (М.: Физматгиз, 1962) с. 189
44. Кизель В А *Отражение света* (М.: Наука, 1973)
45. Rayleigh R *Philos. Mag.* **33** 1 (1892)
46. Rayleigh R *Philos. Mag.* **16** 444 (1908)
47. Schmidt K E F *Ann. Phys. (Leipzig)* **52** 75 (1894)
48. Lummer O, Sorge K *Ann. Phys. (Leipzig)* **31** 325 (1910)
49. Raman C V, Ramdas L A *Philos. Mag.* **3** 220 (1927)
50. Raman C V, Ramdas L A *Proc. R. Soc. London Ser. A* **109** 272 (1925)
51. Кизель В А *ЖЭТФ* **29** 659 (1955)
52. Розенберг Г В *Оптика тонкослойных покрытий* (М.: Физматгиз, 1958)
53. Drude P *Ann. Phys. Chem.* **51** 77 (1894)
54. Друде П *Оптика* (М.: ОНТИ, 1935)
55. Сивухин Д В *ЖЭТФ* **18** 976 (1948)
56. Сивухин Д В *ЖЭТФ* **21** 367 (1951)
57. Сивухин Д В *ЖЭТФ* **30** 376 (1956)
58. Гадомский О Н, Сухов С В *Опм. и спектр.* **89** (2) 287 (2000)
59. *Near-Field Optics* (NATO ASI Series. Ser. E, N 242, Eds D W Pohl, D Courjon) (Dordrecht: Kluwer Acad., 1993)
60. Barchiesi D et al. *Phys. Rev. E* **54** 4285 (1996)
61. Bachelot R, Gleyzes P, Boccara A C *Appl. Opt.* **36** 2160 (1997)
62. Xiao M J. *Opt. Soc. Am. A* **14** 2977 (1997)
63. Ashino M, Ohtsu M *Appl. Phys. Lett.* **72** 1299 (1998)
64. Zayats A V *Opt. Commun.* **161** 156 (1999)
65. Kawata A, Inouye Y, Sugiura T *Jpn. J. Appl. Phys., Pt. 2* **33** PL1725 (1994)
66. Крутицкий К В, Сухов С В *Опм. и спектр.* (2000)
67. Malyshev V, Moreno P *Phys. Rev. A* **53** 416 (1996)
68. Гадомский О Н, Воронов Ю Ю *Письма в ЖЭТФ* **69** 750 (1999)
69. Гадомский О Н, Воронов Ю Ю *Ж. прикл. спектр.* **66** 765 (1999)
70. Валиев К А *УФН* **169** 691 (1999)
71. Килин С Я *УФН* **169** 507 (1999)
72. Гадомский О Н, Куницын А С *Опм. и спектр.* **90** (2001) (в печати)
73. Гадомский О Н, Сухов С В *Квант. электрон.* **25** 529 (1998)

Two electron problem and the nonlocal equations of electrodynamics

O.N. Gadomskii

Ul'yanovsk State University,
ul. L. Tolstogo 42, 432700 Ul'yanovsk, Russian Federation
Tel. (8422) 32-15 98
E-mail: qed_group@mail.ru

A survey is offered of the current knowledge of nonlocal electrodynamic equations which in some cases (e.g., in solving various boundary problems in optics) can replace Maxwell's equations. The nonlocal equations are derived using a semi-classical or a quantum-mechanical approach. The former approach involves an expansion of retarded potentials in appropriate parameters followed by a transition, to terms of order v^2/c^2 , to quantum mechanical operators in the Lagrangian of the system of moving charges. The quantum electrodynamics approach is to consider second- and third-order quantum electrodynamic effects for two hydrogen-like atoms arbitrarily far apart. Various nonlocal equations are derived for the propagation of photons and electromagnetic waves in spin systems, insulators, and metals, taking into account a variety of quantum transitions and intermediate states in the spectrum of the interacting atoms. By combining nonlocal field equations with relevant constitutive equations, a number of typical boundary value problems of optics are solved for semi-infinite media, superthin films, and for objects of dimension very small compared with a light wavelength.

PACS numbers: 03.50.Kk, 78.66.-w

Bibliography — 73 references

Received 5 June 2000