

## Взаимодействие света с веществом.

### Экзамен. Модель атома Томсона. Комплексная поляризуемость атомов.

Когда Томсон придумывал свою модель атома, еще не было известно, что в атоме есть положительное ядро. Томсон представлял себе атом, как положительную каплю объемного заряда, в которой плавают точечные электроны.

Сегодня логичнее считать наоборот. Точечное положительное ядро плавает в центре объемного заряда электронов. Под действием внешнего электрического поля, например поля световой волны, электронное облако слегка смещается относительно неподвижного ядра, так как почти вся масса атома сосредоточена в его ядре.

В соответствии с этой моделью атома будем считать, что электронное облако образует шар с постоянной плотностью заряда  $(-\rho)$ , где  $\rho > 0$ . Под действием внешнего электрического поля  $\vec{E}$  световой волны смещается только электронная оболочка. Электронная оболочка смещается без деформации, а со стороны ядра на электронную оболочку действует возвращающая сила.

Составим дифференциальное уравнение для движения центра масс электронной оболочки.

Пусть  $\vec{F}_1$  — сила, действующая на электронную оболочку со стороны светового поля  $\vec{E}$ .

$\vec{F}_1 = (-q) \cdot \vec{E}$ , где  $q$  — заряд атомного ядра, а  $(-q)$  — заряд электронной оболочки.

Пусть  $\vec{F}_2$  — сила, действующая на электронную оболочку со стороны атомного ядра. Гораздо проще найти равную ей силу, с которой электронная оболочка действует на ядро. Для этого надо найти электрическое поле однородно заряженного шара с плотностью заряда  $(-\rho)$  и умножить поле на заряд ядра  $q$ .

Электрическое поле шара можно найти по теореме Гаусса

$$\Phi_E = 4\pi Q \quad \Rightarrow \quad ES = 4\pi(-\rho)V \quad \Rightarrow$$

$$E \cdot 4\pi r^2 = 4\pi \cdot (-\rho) \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 \quad \Rightarrow \quad \vec{E} = -\frac{4}{3}\pi\rho\vec{r}.$$

Силу, действующую на электронную оболочку со стороны ядра, мы обозначили, как  $\vec{F}_2$ . Тогда сила, действующая на ядро со стороны электронной оболочки, отличается знаком:

$$-\vec{F}_2 = q \cdot \vec{E} = q \cdot \left( -\frac{4}{3}\pi\rho\vec{r} \right) \quad \Rightarrow$$

$$\vec{F}_2 = \frac{4}{3}\pi\rho q\vec{r}.$$

Здесь  $\vec{r}$  — вектор, проведенный из центра электронной оболочки в атомное ядро. Заменим  $\vec{r} \rightarrow (-\vec{r})$ , тогда

$\vec{F}_2 = -\frac{4}{3}\pi\rho q\vec{r}$  — сила, действующая на электронную оболочку со стороны

ядра,  $\vec{r}$  — вектор, проведенный из ядра в центр масс электронного облака.

Второй закон Ньютона для электронной оболочки атома примет следующий вид:

$$\vec{F}_1 + \vec{F}_2 = m\ddot{\vec{r}},$$

где  $\ddot{\vec{r}}$  — вторая производная от радиус-вектора центра масс электронной оболочки по времени или ускорение электронной оболочки.

Подставим значения  $\vec{F}_1$ ,  $\vec{F}_2$  и получим

$$-q\vec{E} - \frac{4}{3}\pi\rho q\vec{r} = m\ddot{\vec{r}}$$

Чтобы уравнение движения электронной оболочки правильно описывало экспоненциально затухающий световой пучок, которому соответствует экспериментально наблюдаемая лоренцевская форма спектральной линии, добавим в уравнение движения вязкое трение в виде силы  $\vec{F}_3$  пропорциональной скорости  $\dot{\vec{r}}$

$$\vec{F}_3 = -2\gamma m\dot{\vec{r}}.$$

Вязкое трение введено вместо потерь энергии электронной оболочки на излучение световых волн. С учетом силы вязкого трения  $\vec{F}_3$  уравнение движения примет следующий вид

$$-q\vec{E} - \frac{4}{3}\pi\rho q\vec{r} - 2\gamma m\dot{\vec{r}} = m\ddot{\vec{r}} \quad \Rightarrow$$

$$\ddot{\vec{r}} + 2\gamma\dot{\vec{r}} + \frac{4\pi\rho q}{3m}\vec{r} = -\frac{q}{m}\vec{E}.$$

В этом уравнении движения центра масс электронной оболочки введем обозначение

$$\omega_0^2 \equiv \frac{4\pi\rho q}{3m}$$

(системе СИ  $\omega_0^2 \equiv \frac{\rho q}{3\varepsilon_0 m}$ ) и получим

$$\ddot{\vec{r}} + 2\gamma\dot{\vec{r}} + \omega_0^2\vec{r} = -\frac{q}{m}\vec{E}.$$

Рассмотрим это уравнение в комплексном виде

$$\ddot{\tilde{r}} + 2\gamma\dot{\tilde{r}} + \omega_0^2\tilde{r} = -\frac{q}{m}\tilde{E}_0\vec{e}_p e^{-i\omega t},$$

где  $\tilde{E} = \tilde{E}_0\vec{e}_p e^{-i\omega t}$  — комплексное световое поле,  $\vec{e}_p$  — единичный вектор поляризации светового поля.

Полученное дифференциальное уравнение линейно относительно переменной  $\vec{r}$ , и все коэффициенты левой части уравнения вещественны. В таком случае вещественная часть комплексного решения уравнения будет равна

вещественному решению уравнения с вещественным световым полем в правой части уравнения:

$$\vec{E} = \text{Re}(\tilde{\vec{E}}) = \text{Re}(\tilde{E}_0 \vec{e}_p e^{-i\omega t}).$$

Будем искать стационарное решение комплексного уравнения с постоянной комплексной амплитудой  $\tilde{r}_0$  в виде  $\tilde{\vec{r}}(t) = \tilde{r}_0 \vec{e}_p e^{-i\omega t}$ . Подставим это решение в дифференциальное уравнение. Каждое слагаемое уравнения будет иметь сомножитель  $\vec{e}_p e^{-i\omega t}$ . Сократим на этот сомножитель и получим уравнение для комплексной амплитуды  $\tilde{r}_0$ :

$$-\omega^2 \tilde{r}_0 - 2i\omega\gamma \tilde{r}_0 + \omega_0^2 \tilde{r}_0 = -\frac{q}{m} \tilde{E}_0 \quad \Rightarrow$$

$$\tilde{r}_0 = -\frac{\frac{q}{m} \tilde{E}_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma} \quad \text{— комплексная амплитуда колебаний электронной}$$

оболочки атома в световом поле с вещественной амплитудой  $E_0$  и частотой  $\omega$ .

Вещественный радиус-вектор электронной оболочки при этом имеет вид

$$\text{Re}(\tilde{\vec{r}}) = \text{Re}(\tilde{r}_0 \vec{e}_p e^{-i\omega t}) = \text{Re} \left( \left( -\frac{\frac{q}{m} \tilde{E}_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma} \right) \vec{e}_p e^{-i\omega t} \right).$$

Эти колебания электронной оболочки атома относительно ядра атома означают колебания дипольного момента атома:

$\vec{p}(t) = (-q) \cdot \vec{r}(t)$ , где  $(-q)$  — заряд электронной оболочки. Такое выражение для дипольного момента получается, если воспользоваться определением  $\vec{p} \equiv \sum_i q_i \vec{r}_i$  и поместить начало координат в ядро атома. В таком

случае радиус-вектор ядра равен нулю, и в сумме остается одно слагаемое для всей электронной оболочки, как целого.

Комплексная амплитуда колебаний дипольного момента примет следующий вид

$$\tilde{p}_0 = (-q) \cdot \tilde{r}_0 = \frac{\frac{q^2}{m} \tilde{E}_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma}.$$

Комплексный дипольный момент  $\tilde{\vec{p}}$  связан с комплексной напряженностью светового поля  $\tilde{\vec{E}}$  через комплексную поляризуемость атома  $\tilde{\alpha}$ :

$$\tilde{\vec{p}} = \tilde{\alpha} \tilde{\vec{E}}.$$

Тогда из соотношений 
$$\begin{cases} \tilde{\vec{p}} = \tilde{p}_0 \cdot \vec{e}_p \cdot e^{-i\omega t} \\ \tilde{\vec{E}} = \tilde{E}_0 \cdot \vec{e}_p \cdot e^{-i\omega t} \\ \tilde{\vec{p}} = \tilde{\alpha} \tilde{\vec{E}} \end{cases}$$
 получаем связь комплексной

амплитуды дипольного момента и комплексной амплитуды светового поля

$$\tilde{p}_0 = \tilde{\alpha} \tilde{E}_0 \Rightarrow$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{\tilde{p}_0}{\tilde{E}_0} = \frac{q^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma} \text{ — комплексная поляризуемость атома Томсона,}$$

как функция частоты светового поля  $\omega$ , где  $q$  — заряд ядра атома,  $m$  — масса электронной оболочки атома.

Пусть  $f$  — число электронов атома, тогда

$$\begin{cases} q = fe \\ m = fm_e \end{cases}, \text{ где } e \text{ — модуль заряда электрона, } m_e \text{ — масса электрона,}$$

тогда

$$\tilde{\alpha} = \frac{f e^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma}, \text{ где } \omega_0 \text{ — резонансная частота колебаний}$$

электронной оболочки атома. В системе СИ формула выглядит также.

По квантовым причинам электронная оболочка атома имеет не одну, а много резонансных частот  $\omega_k$ .

С некоторой натяжкой можно сказать, что в разных резонансных колебаниях  $\omega_k$  участвует разное, не обязательно целое, число электронов  $f_k$ .

Тогда

$$\tilde{\alpha} = \sum_k \frac{f_k \frac{e^2}{m_e}}{\omega_k^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma_k}.$$

Величину  $f_k$  называют силой осциллятора.

Формально сумма всех сил осцилляторов  $\sum_k f_k$  — это сумма всех

электронов, участвующих в колебаниях электронной оболочки, то есть порядковый номер элемента в таблице Менделеева. Однако обычно возбуждение электронов внутренних оболочек не рассматривается. Частоты их возбуждения относятся к рентгеновскому диапазону.

Если рассматривать возбуждение только внешнего электрона атома и комплексную поляризуемость  $\tilde{\alpha}$ , как сумму вкладов только по

соответствующим частотам возбуждения внешнего электрона, то правило сумм примет следующий вид  $\sum_k f_k = 1$ .

**Экзамен. Комплексный показатель преломления. Его связь с коэффициентом поглощения и вещественным показателем преломления. Закон Бугера — Ламберта — Бера.**

В начале курса мы рассматривали распространение света в прозрачной изотропной среде. Среда, поглощающая свет, отличается от прозрачной среды тем, что поляризация поглощающей среды осциллирует на оптической частоте со сдвигом фазы относительно светового поля проходящей волны. При этом для светового поля в поглощающей свет среде получается то же самое волновое уравнение только с комплексным коэффициентом. Обсудим это подробнее.

Комплексная поляризуемость атома  $\tilde{\alpha}$  означает, что осциллирующее световое поле  $\vec{E}$  наводит в атоме дипольный момент  $\vec{p}$ , осциллирующий на той же частоте, что и световое поле, но со сдвигом фазы. В таком случае вводят комплексный коэффициент пропорциональности  $\tilde{\alpha}$ , такой что  $\vec{p} = \tilde{\alpha} \vec{E}$ . Осциллирующие дипольные моменты атомов создают осциллирующую поляризацию среды  $\vec{P} = \frac{d\vec{p}}{dV}$  — объемную плотность дипольного момента.

Поляризация осциллирует с тем же сдвигом фазы относительно светового поля  $\vec{E}$ , что и каждый дипольный момент  $\vec{p}$ . С поляризацией среды связан вектор электрической индукции  $\vec{D} \equiv \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ . Если поляризация осциллирует с фазовым сдвигом относительно поля  $\vec{E}$ , то и вектор  $\vec{D}$  осциллирует со сдвигом фазы, хотя и с другим. Поэтому коэффициент пропорциональности между комплексными векторами  $\vec{D}$  и  $\vec{E}$  — тоже комплексная величина  $\vec{D} = \tilde{\epsilon} \vec{E}$ , здесь  $\tilde{\epsilon}$  — комплексная диэлектрическая проницаемость. Как и для постоянного электрического поля, нелинейная зависимость  $\tilde{\epsilon} - 1$  от  $\tilde{\alpha}$  определяется тем, что поле, действующее на атом, отличается от среднего поля в среде.

С учетом этого эффекта получается формула Клаузиуса — Моссотти

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4}{3} \pi N \alpha .$$

Для электрического поля на частоте  $\omega$  аналогичные рассуждения приводят к тому же соотношению между комплексной диэлектрической проницаемостью  $\tilde{\epsilon}$  и комплексной поляризуемостью атома  $\tilde{\alpha}$ .

$$\frac{\tilde{\epsilon} - 1}{\tilde{\epsilon} + 2} = \frac{4}{3} \pi N \tilde{\alpha}$$

Таким образом, формула Клаузиуса — Моссотти позволяет найти комплексную диэлектрическую проницаемость среды  $\tilde{\epsilon}$  через комплексную поляризуемость атома Томсона

$$\tilde{\alpha} = \frac{f \frac{e^2}{m_e}}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma}.$$

Введем в рассмотрение еще две комплексные величины: комплексное волновое число  $\tilde{k}$  и комплексный показатель преломления  $\tilde{n}$ .

Рассматривая световое поле в прозрачной среде, мы из уравнений Максвелла вывели волновое уравнение для электрического поля  $\vec{E}$ . Совершенно аналогично выводится волновое уравнение для случая поглощающей среды. Берем ротор от одного из уравнений системы Максвелла

$$\text{rot}(\vec{E}) = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

и с учетом другого уравнения системы уравнений Максвелла

$\frac{1}{\tilde{\mu}} \cdot \text{rot}(\vec{B}) = \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$  получается волновое уравнение для поля  $\vec{E}$ :

$$\Delta \vec{E} - \frac{\tilde{\epsilon}\tilde{\mu}}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0.$$

Только теперь в этом уравнении поле  $\vec{E}$  и диэлектрическая проницаемость  $\tilde{\epsilon}$  — комплексные величины.

Для прозрачной среды  $\frac{\epsilon\mu}{c^2} = \frac{1}{V^2} = \frac{n^2}{c^2}$ , где  $V = \frac{c}{n}$  — фазовая скорость света

в среде,  $n = \sqrt{\epsilon\mu}$  — показатель преломления среды. Аналогично для среды поглощающей свет введем комплексный показатель преломления  $\tilde{n} \equiv \sqrt{\tilde{\epsilon}\tilde{\mu}}$ . Тогда

$$\Delta \vec{E} - \frac{\tilde{n}^2}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$$

Прямой подстановкой в это уравнение можно убедиться, что оно имеет решение в виде монохроматических волн

$$\vec{E}(t, \vec{r}) = \vec{E}_0 \cdot e^{i\left(\tilde{k} \cdot \vec{r} - \omega t\right)},$$

$$\text{при условии } \tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2 + \tilde{k}_z^2 = \tilde{n}^2 \frac{\omega^2}{c^2}.$$

Назовем величину  $\tilde{k} \equiv \frac{\omega}{c} \tilde{n} = \sqrt{\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2 + \tilde{k}_z^2}$  комплексным волновым числом. Любопытно, что комплексное волновое число не является длиной комплексного волнового вектора  $\tilde{k}$ , так как длина любого комплексного вектора — вещественное число  $|\tilde{k}| = \sqrt{\tilde{k}_x \tilde{k}_x^* + \tilde{k}_y \tilde{k}_y^* + \tilde{k}_z \tilde{k}_z^*}$ .

$$\text{В оптике } \tilde{\mu} \approx 1. \text{ Тогда } \tilde{n} \equiv \sqrt{\tilde{\varepsilon}\tilde{\mu}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\varepsilon} = \tilde{n}^2$$

для комплексных  $\tilde{\varepsilon}$  и  $\tilde{n}$ .

Будем вещественные части комплексных чисел обозначать одним штрихом, а мнимые — двумя штрихами:

$$\begin{cases} \tilde{\varepsilon} = \varepsilon' + i\varepsilon'' \\ \tilde{k} = k' + ik'' \\ \tilde{n} = n' + in'' \\ \tilde{\alpha} = \alpha' + i\alpha'' \end{cases}.$$

Рассмотрим световую волну, распространяющуюся вдоль оси  $z$ . Тогда от

$x$  и  $y$  координат выражение для волны  $\tilde{E}(t, \vec{r}) = \vec{E}_0 \cdot e^{i\left(\left(\tilde{k}, \vec{r}\right) - \omega t\right)}$  не зависит.

Следовательно,

$\left(\tilde{k}, \vec{r}\right) = \tilde{k}_x x + \tilde{k}_y y + \tilde{k}_z z = \tilde{k}_z z = \tilde{k}z$ , где  $\tilde{k}$  — комплексное волновое число,  $\tilde{k}_x = \tilde{k}_y = 0$  и  $\tilde{k}_z = \tilde{k}$ .

Подставим это в рассматриваемое решение волнового уравнения и получим

$$\tilde{E}(t, \vec{r}) = \vec{E}_0 \cdot e^{i\left(\left(\tilde{k}, \vec{r}\right) - \omega t\right)} = \vec{E}_0 \cdot e^{i(\tilde{k}z - \omega t)}.$$

Подставим сюда выражение для комплексного волнового числа через комплексный показатель преломления:

$$\tilde{k} = \frac{\omega}{c} \tilde{n} = \frac{\omega}{c} n' + i \frac{\omega}{c} n'',$$

и получим

$$\tilde{E}(t, \vec{r}) = \vec{E}_0 \cdot e^{i\left(\frac{\omega}{c} n' z + i \frac{\omega}{c} n'' z - \omega t\right)} = \vec{E}_0 \cdot e^{-\frac{\omega}{c} n'' z} \cdot e^{i\left(\frac{\omega}{c} n' z - \omega t\right)}.$$

Здесь  $\vec{E}_0 \cdot e^{-\frac{\omega}{c} n'' z} = \vec{E}_0(z)$  — амплитуда, зависящая от  $z$  координаты.

$$I(z) = \frac{cn_0}{8\pi\mu} |E_0(z)|^2 = \frac{cn_0}{8\pi\mu} \cdot E_0^2 \cdot e^{-2\frac{\omega}{c} n'' z} \quad \text{— интенсивность света, зависящая}$$

от  $z$  координаты. Здесь  $n_0$  — показатель преломления вдали от линии поглощения (слишком долго нужно объяснять, почему именно так; смотрите  $n \rightarrow n_0$  в вопросе "Скоростные уравнения" в моем курсе "Нелинейная лазерная спектроскопия").

Сравним это выражение с установленным на опыте законом Бугера (он же закон Бугера — Ламберта — Бера):

$$I(z) = I(0) \cdot e^{-\kappa z},$$

который одновременно является определением коэффициента поглощения  $\aleph$  (я пытался подобрать похожее изображение в MathType для греческой рукописной буквы каппа  $\kappa$ ).

Сравнивая два выражения для  $I(z)$  получим:

$$\aleph = 2 \frac{\omega}{c} n'' \quad \text{— коэффициент поглощения связан с мнимой частью } n''$$

комплексного показателя преломления  $\tilde{n}$ .

$$\text{Вернемся к анализу выражения } \tilde{E}(t, \vec{r}) = \tilde{E}_0 \cdot e^{-\frac{\omega}{c} n'' z} \cdot e^{i \left( \frac{\omega}{c} n' z - \omega t \right)}.$$

Здесь в показателе экспоненты с мнимым показателем величина  $\frac{\omega}{c} n' z - \omega t$  является фазой затухающей световой волны.

Найдем фазовую скорость этой волны или скорость движения поверхности равных фаз.

$$\frac{\omega}{c} n' z - \omega t = \text{const} \quad \text{— уравнение поверхности равных фаз.}$$

Считая, что  $z$  — это функция от  $t$ , возьмем производную по времени от уравнения поверхности равных фаз и получим:

$$\frac{\omega}{c} n' \frac{dz}{dt} - \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad V_\phi = \frac{dz}{dt} = \frac{c}{n'}$$

$$V_\phi = \frac{c}{n'} \quad \text{— фазовая скорость затухающей в среде волны.}$$

Следовательно, вещественная часть комплексного показателя преломления поглощающей свет среды играет роль обычного показателя преломления прозрачной среды.

### Экзамен. Лоренцевская форма линии поглощения в модели атома Томсона. Нормальная и аномальная дисперсия света.

Упростим выражение для комплексной поляризуемости атома Томсона

$$\tilde{\alpha} = \frac{f \frac{e^2}{m_e}}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma}$$

на случай, когда частота света  $\omega$  близка к резонансной частоте атома  $\omega_0$ .

Введем обозначение  $\Omega \equiv \omega - \omega_0$  для расстройки частоты света относительно резонансной частоты атома.

Тогда  $|\Omega| \ll \omega_0$ .

Из равенства  $\Omega = \omega - \omega_0$  получим

$$\omega = \omega_0 + \Omega \quad \Rightarrow$$

$$\omega^2 = (\omega_0 + \Omega)^2 \approx \omega_0^2 + 2\omega_0\Omega \quad \Rightarrow$$

$$\omega_0^2 - \omega^2 \approx -2\omega_0\Omega.$$



Тогда из равенства  $\tilde{\alpha} = \frac{f \frac{e^2}{m_e}}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma}$  получаем

$$\tilde{\alpha} = \frac{f \frac{e^2}{m_e}}{-2\omega_0\Omega - 2i\omega\gamma}.$$

С учетом того, что  $\omega \approx \omega_0$ ,  $\gamma \ll \omega_0$ ,  $\Omega \ll \omega_0$ , а величины  $\gamma$  и  $\Omega$  одного порядка, заменим в знаменателе  $\omega$  на  $\omega_0$  и получим:

$$\tilde{\alpha} \approx \frac{f \frac{e^2}{m_e}}{-2\omega_0\Omega - 2i\omega_0\gamma} = -\frac{f \frac{e^2}{m_e}}{2\omega_0} \cdot \frac{1}{\Omega + i\gamma} = -\frac{fe^2}{2m_e\omega_0} \cdot \frac{\Omega - i\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2}.$$

Теперь получим выражение для комплексного показателя преломления  $\tilde{n}$  в относительно простом случае низкой концентрации атомов (в газе) и вблизи резонансной частоты атома Томсона.

Для начала подставим в формулу Клаузиуса — Моссогги  $\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{4}{3}\pi N\alpha$

вместо  $\varepsilon$  величину  $\tilde{n}^2$  и получим формулу Лоренц — Лорентца

$$\frac{\tilde{n}^2 - 1}{\tilde{n}^2 + 2} = \frac{4}{3}\pi N\tilde{\alpha} \quad (\text{в СИ: } \frac{\tilde{n}^2 - 1}{\tilde{n}^2 + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0}N\tilde{\alpha})$$

которая связывает комплексный показатель преломления  $\tilde{n}$  и комплексную поляризуемость атома  $\tilde{\alpha}$  для любой концентрации атомов  $N$ , а не только для низкой концентрации, как в газах.

Заметим, что вдали от резонансной частоты атома показатель преломления и поляризуемость атома становятся вещественными величинами, и уравнение Лоренц — Лорентца оказывается справедливым для вещественных  $n$  и  $\alpha$  в частотной области прозрачности среды.

Рассмотрим теперь газовую среду с малой плотностью. В этом случае формулу Лоренц — Лорентца можно упростить.

При стремлении концентрации молекул к нулю  $N \rightarrow 0$  показатель преломления стремится к единице  $\tilde{n} \rightarrow 1$ , так как нулевая концентрация соответствует вакууму, и в вакууме показатель преломления равен единице.

В таком случае при малой концентрации получим:

$$\begin{cases} \tilde{n}^2 + 2 \approx 3 \\ \tilde{n} + 1 \approx 2 \end{cases}.$$

Тогда из формулы Лоренц — Лорентца  $\frac{\tilde{n}^2 - 1}{\tilde{n}^2 + 2} = \frac{4}{3}\pi N\tilde{\alpha}$  получим

$$\frac{(\tilde{n} - 1)(\tilde{n} + 1)}{\tilde{n}^2 + 2} = \frac{4}{3}\pi N\tilde{\alpha} \text{ и с учетом } \begin{cases} \tilde{n}^2 + 2 \approx 3 \\ \tilde{n} + 1 \approx 2 \end{cases} \text{ получим}$$

$$\frac{(\tilde{n}-1)2}{3} = \frac{4}{3} \pi N \tilde{\alpha} \quad \Rightarrow$$

$$\tilde{n} \approx 1 + 2\pi N \tilde{\alpha}.$$

Подставим сюда выражение комплексной поляризуемости атома Томсона вблизи резонансной частоты атома:

$$\tilde{\alpha} \approx -\frac{fe^2}{2m_e\omega_0} \cdot \frac{\Omega - i\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2}$$

и получим

$$\tilde{n} = 1 - \pi N f \frac{e^2}{m_e\omega_0} \cdot \frac{\Omega - i\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2}.$$

Сравнивая это выражение с  $\tilde{n} = n' + in''$ , получим выражение для вещественной и мнимой части комплексного показателя преломления:

$$\begin{cases} n' = 1 - \pi N f \frac{e^2}{m_e\omega_0} \cdot \frac{\Omega}{\Omega^2 + \gamma^2} \\ n'' = \pi N f \frac{e^2}{m_e\omega_0} \cdot \frac{\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2} \end{cases}.$$

С учетом связи коэффициента поглощения с мнимой частью показателя преломления  $\aleph = 2\frac{\omega}{c}n'' = 2\pi N f \frac{e^2}{m_e c} \cdot \frac{\omega}{\omega_0} \cdot \frac{\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2} \approx 2\pi N f \frac{e^2}{m_e c} \cdot \frac{\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2}$ , так как  $\omega \approx \omega_0$ . Тогда для разреженной среды в частотной окрестности линии поглощения с частотой  $\omega_0$  получаем:

$$\begin{cases} \aleph = 2\pi N f \frac{e^2}{m_e c} \cdot \frac{\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2} \\ n' = 1 - \pi N f \frac{e^2}{m_e\omega_0} \cdot \frac{\Omega}{\Omega^2 + \gamma^2} \end{cases} \quad (\text{в СИ: } \begin{cases} \aleph = N f \frac{e^2}{2\varepsilon_0 m_e c} \cdot \frac{\gamma}{\Omega^2 + \gamma^2} \\ n' = 1 - N f \frac{e^2}{4\varepsilon_0 m_e \omega_0} \cdot \frac{\Omega}{\Omega^2 + \gamma^2} \end{cases} ).$$

Если теперь вспомнить, что в реальном атоме оказывается много резонансных частот, то коэффициент поглощения и показатель преломления будут иметь выражение в виде суммы по резонансным частотам:

$$\begin{cases} \aleph = 2\pi N \frac{e^2}{m_e c} \sum_k f_k \frac{\gamma_k}{\Omega_k^2 + \gamma_k^2} \\ n' = 1 - \pi N \frac{e^2}{m_e} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k} \cdot \frac{\Omega_k}{\Omega_k^2 + \gamma_k^2} \end{cases}.$$

Здесь  $N$  — концентрация атомов,  $f_k$  — оптическая сила осциллятора на резонансной частоте  $\omega_k$ ,  $e$  — модуль заряда электрона,  $m_e$  — масса электрона,  $\gamma_k$  — коэффициент пропорциональности в выражении силы вязкого трения для

описания потерь на излучение,  $\Omega_k = \omega - \omega_k$  — расстройка частоты светового поля  $\omega$  относительно частоты поглощающего свет перехода  $\omega_k$ .

Эти формулы оказываются справедливы и при рассмотрении взаимодействия света с веществом в рамках квантовой механики.

-----

Проанализируем вклад в коэффициент поглощения от одного поглощающего перехода. Коэффициент поглощения можно переписать в виде:

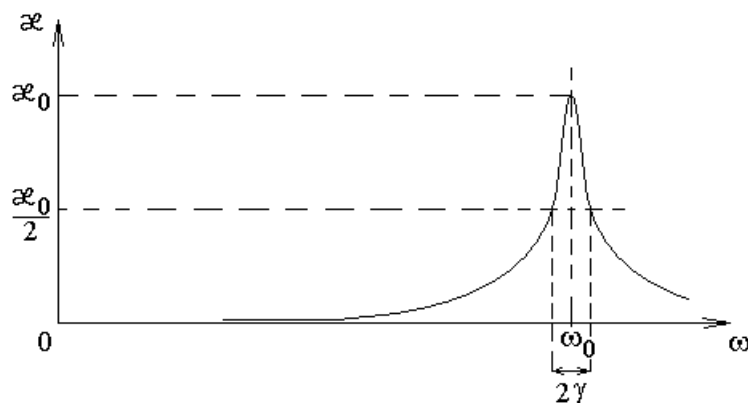
$$\kappa = \frac{\kappa_0}{1 + \left(\frac{\Omega}{\gamma}\right)^2}, \text{ где } \kappa_0 = 2\pi \frac{e^2 f N}{m_e c \gamma} \text{ (в системе СИ } \kappa_0 = N f \frac{e^2}{2\epsilon_0 m_e c \gamma}).$$

Контур поглощения обычно называют линией поглощения, так как относительная спектральная ширина контура поглощения одиночного атома (как и контура излучения) в видимом диапазоне спектра очень мала  $\frac{2\gamma}{\omega_0} \approx 2 \cdot 10^{-8}$ , а в инфракрасном диапазоне — еще меньше. Для молекулы при  $\omega_0$

возбуждении ее колебания относительная спектральная ширина линии поглощения еще на несколько порядков меньше. Если же атом (или молекула) не одиночный, то к величине  $\gamma$  добавляется частота столкновений атома, поэтому с изменением давления газа спектральная ширина линий изменяется на много порядков, а для твердых тел и жидкостей относительная спектральная ширина становится настолько большой, что вместо линии поглощения говорят о спектральной полосе поглощения.

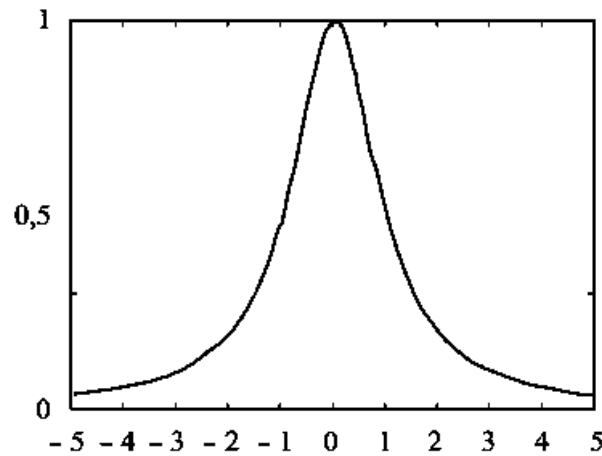
Формуле  $\kappa = \frac{\kappa_0}{1 + \left(\frac{\Omega}{\gamma}\right)^2}$  соответствует следующая зависимость

коэффициента поглощения от частоты света:



Здесь  $\gamma$  — полуширина на полувывоте контура линии поглощения, раньше мы обозначали эту величину  $\Gamma$ .

В спектроскопии такой контур рассматривают очень часто. Его называют лоренцевским контуром  $\mathcal{L}(x) \equiv \frac{1}{1+x^2}$ . На следующем рисунке представлен рассчитанный в Matlab график этой функции.



Тогда коэффициент поглощения, как функция частоты света

$$\mathfrak{K} = \mathfrak{K}_0 \cdot \mathcal{L}\left(\frac{\Omega}{\gamma}\right), \text{ где } \Omega = \omega - \omega_0.$$

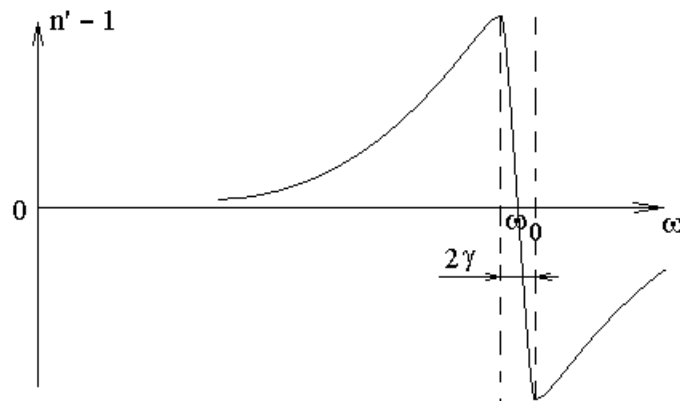
-----

Рассмотрим теперь зависимость вещественного показателя преломления от частоты.

Дисперсия света — зависимость вещественного показателя преломления от частоты света или от длины волны света.

$$n' \approx 1 - \pi N f \cdot \frac{e^2}{m_e \omega_0} \cdot \frac{\Omega}{\Omega^2 + \gamma^2} = 1 - \frac{\mathfrak{N}_0 \lambda_0}{4\pi} \cdot \frac{\frac{\Omega}{\gamma}}{1 + \left(\frac{\Omega}{\gamma}\right)^2},$$

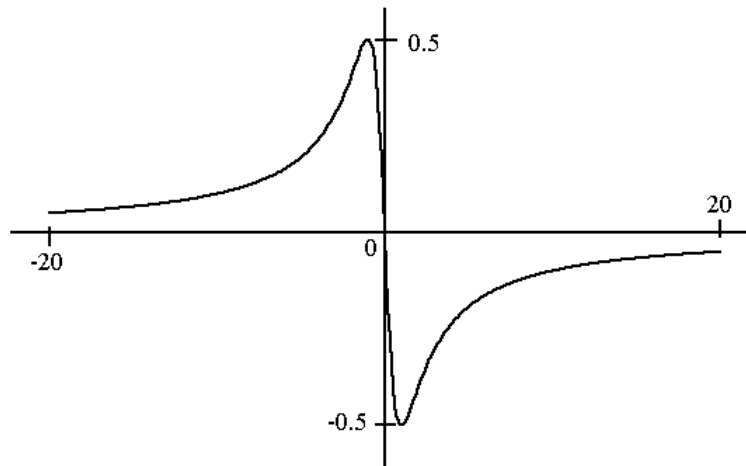
где  $\lambda_0$  — длина волны в вакууме на частоте поглощения  $\omega_0$ ,  $\mathfrak{N}_0$  — амплитуда зависимости коэффициента поглощения от частоты света.



$$n' \approx 1 + \frac{\mathfrak{N}_0 \lambda_0}{4\pi} \cdot \mathcal{D}\left(\frac{\Omega}{\gamma}\right), \text{ где } \Omega = \omega - \omega_0 \text{ и}$$

$\mathcal{D}(x) \equiv -\frac{x}{1+x^2}$  — дисперсионный контур. На следующем рисунке

представлен рассчитанный в Matlab график этой функции.



Добавка к показателю преломления имеет вид так называемого дисперсионного контура.

Как видно из графика зависимости  $n'-1$  от  $\omega$ , производная почти везде положительна  $\frac{dn'}{d\omega} > 0$ , поэтому условие  $\frac{dn}{d\omega} > 0$  называют нормальной дисперсией света. Только внутри линии поглощения в малой окрестности  $\Delta\omega = 2\gamma$  центра линии поглощения  $\omega_0$  наблюдается так называемая аномальная дисперсия света  $\frac{dn}{d\omega} < 0$ .

Вещество в частотной области прозрачности обладает нормальной дисперсией.

Аномальная дисперсия света наблюдается только внутри линии поглощения.

### **Экзамен. Однородный (лоренцевский) и неоднородный (доплеровский) контур спектральной линии.**

Спектральный контур линии поглощения  $\aleph(\omega)$  пропорционален спектральному контуру линии излучения  $G_\omega = 2\pi \frac{cn}{8\pi\mu} |E_0(\omega)|^2$ . Это следует из термодинамических соображений при рассмотрении теплового равновесия излучения и вещества. На каждой частоте, сколько света поглощается столько должно и излучаться. В таком случае будем говорить просто о контуре спектральной линии.

Изолированная молекула (или атом), переходя с возбужденного уровня энергии на нижележащий уровень, излучает световой пучок  $\vec{E} = \vec{E}_0 \cdot e^{-\gamma_0 t} \cdot e^{-i\omega_0 t}$ .

Спектр этого излучения  $G_\omega = G_0 \cdot \mathcal{L}\left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma_0}\right)$ , где  $\mathcal{L}(x) \equiv \frac{1}{1+x^2}$  — лоренцевский контур,  $2\gamma_0$  — естественная ширина спектральной линии.

Если молекул много, то движение молекул изменяет ширину и форму спектральной линии. Есть две основных причины изменения ширины спектральной линии: столкновительное уширение и доплеровское уширение. Оба уширения проще проявляются в газообразной фазе вещества.

Можно доказать, что если столкновения молекул случайным образом обрывают цуг излучения или случайным образом сбивают фазу излучения, то усредненная по молекулам спектральная линия сохраняет лоренцевскую форму, но при этом изменяется ширина спектральной линии. Это так называемое однородное уширение спектральных линий, которое пропорционально частоте столкновений молекулы, которая в свою очередь пропорциональна давлению газа. В результате оказывается, что спектральная ширина линии равна  $2\gamma$ , где величина  $\gamma = \gamma_0 + \gamma_{cm}$  равна сумме двух слагаемых. Первое слагаемое  $\gamma_0$  — частота (единица, деленная на среднее время жизни) спонтанных переходов с верхнего уровня энергии молекулы на нижний уровень (без столкновений молекул). Второе слагаемое  $\gamma_{cm}$  — частота столкновений молекулы с другими молекулами.

-----

Второй механизм уширения спектральных линий — это эффект Доплера, который приводит к так называемому неоднородному уширению спектральной линии (разный вклад молекул с разными скоростями движения). Рассмотрим это уширение подробнее.

Если излучающая молекула летит навстречу наблюдателю, то принимаемая наблюдателем частота  $\omega$  сдвинута эффектом Доплера. С учетом только продольного эффекта Доплера получим

$$\omega = \omega' + kV_z,$$

здесь  $\omega$  — частота света в системе отсчета наблюдателя или, как говорят, в лабораторной системе отсчета;  $\omega'$  — частота света в системе отсчета излучающей молекулы,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  — волновое число,  $V_z$  — проекция скорости молекулы на направление излучения света.

Распределение Максвелла по проекции скорости имеет следующий вид:

$$N_{V_z} dV_z = \frac{N}{U\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{V_z}{U}\right)^2} \cdot dV_z,$$

где  $N$  — концентрация молекул;  $N_{V_z} dV_z$  — концентрация молекул, проекция скорости которых лежит в диапазоне от  $V_z$  до  $V_z + dV_z$ ;  $U = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$  — наиболее вероятная скорость молекул.

Каждая молекула излучает спектральную линию, форма которой имеет лоренцевский вид в ее собственной системе отсчета

$$G_{\omega'} = G_0 \cdot \frac{1}{1 + \left( \frac{\omega' - \omega_0}{\gamma} \right)^2}, \text{ где } \omega' = \omega - kV_z.$$

Тогда в лабораторной системе отсчета с учетом доплеровского сдвига частоты можно записать контур линии поглощения молекулы с проекцией скорости  $V_z$  на направление наблюдения:

$$G_{\omega} = G_0 \cdot \frac{1}{1 + \left( \frac{\omega - kV_z - \omega_0}{\gamma} \right)^2}.$$

Складывая эти спектральные контуры с весовыми множителями, пропорциональными концентрации молекул в интервале скоростей от  $V_z$  до  $V_z + dV_z$ , получим суммарный контур линии излучения газа:

$$G_{\omega} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_0}{1 + \left( \frac{\omega - kV_z - \omega_0}{\gamma} \right)^2} \cdot \frac{N}{U\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{V_z}{U}\right)^2} \cdot dV_z.$$

Здесь постоянный множитель  $\frac{G_0 N}{U\sqrt{\pi}}$  можно отбросить. Тогда

$$G_{\omega} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1 + \left( \frac{\omega - kV_z - \omega_0}{\gamma} \right)^2} \cdot e^{-\left(\frac{V_z}{U}\right)^2} \cdot dV_z.$$

Эту форму спектральной линии называют контуром Фойхта.

-----