

01;05;09

## Аномальные электромагнитные волны в многокомпонентном диэлектрике

© В.М. Дубовик, М.И. Рязанов

Московский инженерно-физический институт (государственный университет),  
115409 Москва, Россия  
e-mail: v lad@kaf6.mephi.ru

(Поступило в Редакцию 29 ноября 2005 г.)

Найдена диэлектрическая проницаемость аморфного диэлектрика, состоящего из нескольких видов молекул. Введены средняя по сортам поляризуемость молекулы и флуктуация поляризуемости, с учетом которых диэлектрическая проницаемость среды обладает пространственной дисперсией. Показано, что вблизи тех частот, где средняя поляризуемость обращается в нуль, диэлектрическая проницаемость определяется средней квадратичной флуктуацией поляризуемости молекулы. Рассмотрены аномальные электромагнитные волны в этих областях частот.

PACS: 41.20.Jb

### Введение

Изменение показателя преломления многокомпонентного диэлектрика при изменении концентрации одной из компонент хорошо известно. Если длина волны поля велика по сравнению с межатомными расстояниями, то применима макроскопическая электродинамика, для которой существенно лишь одно свойство молекулы — ее поляризуемость. Среду из молекул различных сортов удобно рассматривать как состоящую из молекул с поляризуемостью  $\alpha^s(\omega) = \alpha(\omega) + \delta\alpha^s(\omega)$ , где  $\alpha(\omega)$  — средняя по сортам  $s$ -поляризуемость молекулы,  $\delta\alpha^s(\omega)$  — флуктуация поляризуемости. В процессе усреднения по физически бесконечно малому объему молекулы различных сортов участвуют равноправно, так что в результат входит средняя поляризуемость молекулы. Взаимная перемена мест между двумя молекулами разных сортов не меняет полного числа всех молекул на единицу объема, но изменяет локальное значение поляризуемости. Поэтому в многокомпонентном диэлектрике флуктуации поляризуемости молекул более существенны, чем флуктуации плотности. Такой диэлектрик в первом приближении можно рассматривать как однородную среду из молекул, поляризуемость которых ( $\alpha^s(\omega)$ ) является случайной величиной с вероятностью  $w_s$ .

Отметим, что для данной частоты  $\alpha^s(\omega)$  может быть как положительной, так и отрицательной, поэтому  $\alpha(\omega) = \sum_s w_s \alpha^s(\omega)$  может проходить через нуль. Пренебрегая флуктуациями поляризуемости молекул, можно записать формулу Клаузиуса–Моссотти через среднюю поляризуемость молекулы так же, как и в однокомпонентном веществе [1–3]:

$$\epsilon_0(\omega) = \{1 + 8\pi n_0 \alpha(\omega)/3\} / \{1 - 4\pi n_0 \alpha(\omega)/3\}, \quad (1)$$

где  $n_0$  — средняя плотность числа молекул диэлектрика. Очевидно, роль флуктуаций поляризуемости особенно велика для частот, близких к нулям средней поляризуемости  $\alpha(\omega)$ . Поэтому представляют интерес аномальные

волны в многокомпонентном диэлектрике в указанных областях частот.

### Поляризация и диэлектрическая проницаемость многокомпонентного диэлектрика

Поляризация вещества  $\mathbf{P}$  пропорциональна среднему дипольному моменту молекулы, индуцированному в ней полем, и непосредственно связана со средним действующим на молекулу полем, называемому обычно локальным полем  $\mathbf{E}^{\text{loc}}$ . Поэтому для определения поляризации в среднем однородного и изотропного диэлектрика с флуктуациями поляризуемости необходимо найти локальное поле. Обозначим через  $\mathbf{E}^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, \omega)$  фурье-образ по времени микроскопического поля, действующего на расположенную в точке  $\mathbf{R}_a$  молекулу диэлектрика. Локальное поле, действующее на данную молекулу, получается усреднением микроскопического поля по координатам всех остальных молекул (обозначаемым ниже знаком «...») и усреднением по флуктуациям поляризуемости (обозначаемым знаком  $\langle \dots \rangle$ ). Тогда  $\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) = \langle \mathbf{E}^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, \omega) \rangle$ . Введем флуктуации локального поля  $\delta\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) = \langle \mathbf{E}^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, \omega) \rangle - \mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega)$ , обусловленные флуктуациями поляризуемости молекул, очевидно,  $\langle \delta\mathbf{E}^{\text{loc}} \rangle = 0$ . Используя введенные обозначения, запишем фурье-образ по времени поляризации диэлектрика в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{R}_a, \omega) &= n_0 \left\langle [\alpha(\omega) + \delta\alpha^s(\omega)] \right. \\ &\quad \times [\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) + \delta\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega)] \left. \right\rangle \\ &= n_0 [\alpha(\omega) \mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) + \mathbf{F}(\mathbf{R}_a, \omega)], \quad (2) \end{aligned}$$

где  $\mathbf{F}(\mathbf{R}_a, \omega) = \langle \delta\alpha^s(\omega) \delta\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) \rangle$ .

Перейдя в (2) к фурье-образам по координатам молекул и воспользовавшись соотношением (П17) для  $\mathbf{F}(\mathbf{q}, \omega)$  из Приложения, нетрудно выразить  $P_i(\mathbf{q}, \omega)$  через  $E_i^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega)$

$$P_i(\mathbf{q}, \omega) = \{U t_{ik} + V l_{ik}\} E_i^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (3)$$

где

$$U = n_0 [\alpha(\omega) + h(\omega)(Q - J)] [1 - 4\pi n_0 \alpha(\omega)(Q - J)]^{-1}, \quad (4)$$

$$V = n_0 [\alpha(\omega) - h(\omega)L] [1 + 4\pi n_0 \alpha(\omega)L]^{-1}. \quad (5)$$

Переход к фурье-образам полей по координатам в (П8) дает с учетом (П13) уравнение

$$E_i^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega) = E_i^0(\mathbf{q}, \omega) + 4\pi \{Q_{ik}(\mathbf{q}, \omega) - J_{ik}(\mathbf{q}, \omega)\} P_k(\mathbf{q}, \omega), \quad (6)$$

которое связывает поляризацию с первичным полем. Однако, для того чтобы найти диэлектрическую проницаемость, необходимо знать связь поляризации со средним макроскопическим полем  $\mathbf{E}$ . Установить ее можно, используя то обстоятельство, что первичное поле удовлетворяет уравнениям Максвелла в вакууме с теми же источниками поля, что и в уравнениях Максвелла в веществе для макроскопического поля. Тогда уравнения для разности макроскопического и первичного полей не содержат источников и связывают между собой макроскопическое поле  $\mathbf{E}$ , первичное поле  $\mathbf{E}^0$  и поляризацию среды  $\mathbf{P}$ :

$$E_i(\mathbf{q}, \omega) = E_i^0(\mathbf{q}, \omega) + 4\pi \{Q_{ik}(\mathbf{q}, \omega) - \delta_{ik}\} P_k(\mathbf{q}, \omega). \quad (7)$$

Исключив отсюда первичное поле с помощью (6), легко найти

$$E_i(\mathbf{q}, \omega) = E_i^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega) + 4\pi \{(J - 1)t_{ik} + (L - 1)l_{ik}\} P_k(\mathbf{q}, \omega). \quad (8)$$

Подстановка (8) в (3) приводит к уравнению

$$P_i(\mathbf{q}, \omega) = \{U[1 + 4\pi(J - 1)U]^{-1} t_{ik} + V[1 + 4\pi(L - 1)V]^{-1} l_{ik}\} E_k(\mathbf{q}, \omega), \quad (9)$$

отсюда следует, что фурье-образы электрической индукции и поля связаны соотношением

$$D_i(\mathbf{q}, \omega) = \{\varepsilon^{tr}(q, \omega)t_{ik} + \varepsilon^l(q, \omega)l_{ik}\} E_k(\mathbf{q}, \omega), \quad (10)$$

где

$$\varepsilon^{tr}(q, \omega) = [1 + 4\pi JU] / [1 + 4\pi(J - 1)U], \quad (11)$$

$$\varepsilon^l(q, \omega) = [1 + 4\pi LV] / [1 + 4\pi(L - 1)V]. \quad (12)$$

Подстановка в (11) и (12) явных выражений (4) и (5) для  $U$  и  $V$  в (П12) для  $h(\omega)$  дает возможность получить

поперечную и продольную диэлектрические проницаемости в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon^{tr}(q, \omega) &= \{1 + 4\pi n_0 \alpha J + (4\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}})^2 (Q - J) \\ &\times J [1 - 4\pi n_0 \alpha (Q - J)]^{-1}\} \{1 + 4\pi n_0 \alpha (J - 1) \\ &+ (4\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}})^2 (Q - J)(J - 1) [1 - 4\pi n_0 \alpha (Q - J)]^{-1}\}^{-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon^l(q, \omega) &= \{1 + 4\pi n_0 \alpha L - (4\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}})^2 \\ &\times L^2 [1 + 4\pi n_0 \alpha L]^{-1}\} \{1 + 4\pi n_0 \alpha (L - 1) \\ &- (4\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}})^2 L(L - 1) [1 + 4\pi n_0 \alpha L]^{-1}\}^{-1}. \end{aligned} \quad (14)$$

В частном случае, если пренебречь малыми поправками порядка  $qn_0^{-1/3}$  и  $(\omega/c)n_0^{-1/3}$ , в (П14) можно получить  $A = B = 0$ . Тогда  $J = L = 2/3$ , и диэлектрические проницаемости (11)–(14) приобретают вид

$$\varepsilon^{tr}(q, \omega) = \frac{\varepsilon_0(\omega) + (2/9)M(\omega)P(q, \omega)}{1 - (1/9)M(\omega)P(q, \omega)}, \quad (15)$$

$$\varepsilon^l(\omega) = \frac{\varepsilon_0(\omega) - [4/9\varepsilon_0(\omega)]M(\omega)}{1 + [2/9\varepsilon_0(\omega)]M(\omega)}, \quad (16)$$

где

$$M(\omega) = \{4\pi n_0 [\varepsilon_0(\omega) + 2]\delta \alpha_{\text{sq}}/3\}^2,$$

$$P(q, \omega) = [q^2 + 2(\omega/c)^2] / [q^2 - \varepsilon_0(\omega)(\omega/c)^2]. \quad (17)$$

Дисперсионное уравнение поперечной электромагнитной волны, определяемое из соотношения  $q^2 = (\omega/c)^2 \varepsilon^{tr}(q, \omega)$ , и фазовая скорость волны в многокомпонентном диэлектрике с учетом флуктуаций поляризуемости молекул будут иметь вид

$$q = \omega \left[ \varepsilon_0(\omega) + \frac{2}{3} \sqrt{M(\omega)} \right]^{1/2} / c \left[ 1 - \frac{1}{3} \sqrt{M(\omega)} \right]^{1/2}, \quad (18)$$

$$v_\phi = c/n(\omega),$$

где

$$n(\omega) = \left[ \varepsilon_0(\omega) + \frac{2}{3} \sqrt{M(\omega)} \right]^{1/2} / \left[ 1 - \frac{1}{3} \sqrt{M(\omega)} \right]^{1/2}. \quad (19)$$

## Аномальные электромагнитные волны

Обозначим через  $\omega_1$  значение частоты, при которой средняя поляризуемость молекулы диэлектрика обращается в нуль,  $\alpha(\omega_1) = 0$ . Вблизи этой частоты

$$\varepsilon_0(\omega) \cong 1 + 4\pi n_0 \alpha(\omega) \cong 1 + 4\pi \kappa(\omega - \omega_1),$$

$$\kappa = n_0 \partial \alpha(\omega_1) / \partial \omega_1. \quad (20)$$

Тогда из (17) следует, что

$$n \cong \xi^{1/2} [1 + \Lambda(\omega - \omega_1)], \quad (21)$$

где

$$\xi = \{1 + (8\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}}/3)\} / \{1 - (4\pi n_0 \delta \alpha_{\text{sq}}/3)\},$$

$$\Lambda = 2\pi \kappa (\xi + 2) / 3\xi. \quad (22)$$

Дисперсионное уравнение, фазовая и групповая скорости поперечной волны в многокомпонентном диэлектрике, согласно (18), (19) и (21), приобретают вид

$$\omega = qc/\xi^{1/2}[1 + \Lambda(\omega - \omega_1)], \quad (23)$$

$$v_\phi \approx (c/\xi^{1/2})[1 - \Lambda(\omega - \omega_1)],$$

$$v_{gr} \approx c/\xi^{1/2}[1 - \Lambda\omega_1 + 2\Lambda\omega]. \quad (24)$$

Соотношения (23) и (24) указывают на особенности поперечных электромагнитных волн в многокомпонентном аморфном диэлектрике при частотах, близких к нулям средней поляризуемости молекул. Они выражаются в том, что в (23), (24) входит частота волны и средняя квадратичная флуктуация поляризуемости  $\delta\alpha_{sq}$ , а не средняя поляризуемость  $\alpha$ .

### Отражение аномальной волны на поверхности раздела двух сред

Представляет интерес рассмотреть отражение аномальной электромагнитной волны от бездисперсионного диэлектрика. Пусть волна, распространяющаяся в многокомпонентном аморфном диэлектрике, падает на границу раздела с другим диэлектриком с проникаемостью  $\varepsilon_c$ . Для коэффициента отражения при нормальном падении на поверхность раздела волны с частотой, лежащей в окрестности нуля средней поляризуемости молекулы многокомпонентного диэлектрика, согласно (21), имеем

$$R = \frac{[1 + \Lambda(\omega - \omega_1) - (\varepsilon_c/\xi)^{1/2}]^2}{[1 + \Lambda(\omega - \omega_1) + (\varepsilon_c/\xi)^{1/2}]^2}. \quad (25)$$

В случае, когда отраженная волна полностью поляризована, для угла Брюстера  $\theta_B$  получаем

$$\text{tg } \theta_B = (\varepsilon_c/\xi)^{1/2}[1 - \Lambda(\omega - \omega_1)]. \quad (26)$$

Для угла полного внутреннего отражения,  $\theta_R$ , должно выполняться неравенство

$$\sin \theta_R = (\varepsilon_c/\xi)^{1/2}[1 - \Lambda(\omega - \omega_1)] < 1, \quad (27)$$

что возможно только если диэлектрическая проникаемость диэлектрика  $\varepsilon_c$  меньше, чем

$$\varepsilon_c < \xi \{1 + [4\pi k(\omega - \omega_1)(\xi + 2)/3\xi]\}. \quad (28)$$

Из (25)–(28) следует, что вблизи нуля средней поляризуемости молекулы многокомпонентного диэлектрика приведенные выше величины, характеризующие поведение электромагнитной волны при отражении от бездисперсионного диэлектрика, определяются, согласно (22), средней квадратичной флуктуацией поляризуемости молекулы,  $\delta\alpha_{sq}$ .

### Заключение

Отметим, что длина аномальных электромагнитных волн в многокомпонентном диэлектрике ограничена снизу. Пренебрегая флуктуациями поляризуемости молекул и учитывая только структурный вклад в пространственную дисперсию диэлектрика, с помощью (П14) можно представить поперечную диэлектрическую проникаемость  $\varepsilon^{tr}$  в виде

$$\varepsilon^{tr}(q, \omega) = \frac{\varepsilon_0(\omega) + [\varepsilon_0(\omega) - 1]A(q, \omega)}{1 + [\varepsilon_0(\omega) - 1]A(q, \omega)}. \quad (29)$$

Сравним выражение (29) с (14), в котором учтен лишь флуктуационный вклад в пространственную дисперсию диэлектрической проникаемости, имея в виду, что в общем случае значения  $\varepsilon_0(\omega)$  и  $P(q, \omega)$  порядка единицы. Нетрудно убедиться в том, что флуктуационный вклад будет преобладать над структурным, когда  $M \gg A$ , или в соответствии с (17) и (П15)

$$(n_0\delta\alpha_{sq})^2 \gg q^2K \sim (\omega/c)^2K, \quad K \sim n_0^{-2/3}, \quad (30)$$

откуда

$$\lambda \gg n_0^{-4/3}/\delta\alpha_{sq}. \quad (31)$$

В качестве примера проведем оценку  $\lambda$  для двухкомпонентного диэлектрика ( $s = 1, 2$ ). Стандартным образом получаем, что  $\delta\alpha_{sq} = (n_1n_2)^{1/2}|\alpha_1 - \alpha_2|/(n_1 + n_2)$ , где  $n_s$  — плотность числа молекул,  $s$  — компоненты диэлектрика. В общем случае, когда  $n_1 \sim n_2 \sim n_0$  и  $\alpha_1 \sim \alpha_2 \sim \alpha$ , приходим к неравенству  $\lambda \gg n_0^{-1/3}/(n_0\alpha)$ . Из формулы Клаузиуса–Моссотти (1) следует, что  $n_0\alpha \sim 1$ , так как  $\varepsilon_0 \sim 1$  в соответствии с экспериментом. Поэтому, полагая  $n_0 \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ , получаем  $\lambda \gg 10^{-8} \text{ cm}$ , что заведомо справедливо для всего оптического диапазона частот. Заметим, однако, что при тех значениях частоты волны, когда  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  близки, а также в случае малой концентрации второй компоненты вещества,  $c_2 = n_2/(n_1 + n_2) \approx n_2/n_1 \ll 1$ , ограничение может быть более жестким. При этом концентрация  $c_2$  не может быть слишком малой, так как в противном случае будет нарушено условие применимости макроскопической электродинамики  $\lambda \gg n_2^{-1/3}$  для молекул второй компоненты.

### Приложение

Получим соотношение, связывающее  $\mathbf{F}(\mathbf{q}, \omega)$  с фурье-образом локального поля  $\mathbf{E}^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega)$ . Микроскопическое поле  $\mathbf{E}^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, t)$ , действующее на расположенную в точке  $\mathbf{R}_a$  молекулу диэлектрика, складывается из первичного поля  $\mathbf{E}^0(\mathbf{R}_a, t)$ , созданного источниками в вакууме, и вторичных полей, созданных дипольными моментами  $\mathbf{d}_s(\mathbf{R}_a, t) = \int d\omega\alpha^s(\omega)\mathbf{E}^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, \omega)\exp(-i\omega t)$  остальных молекул. Поэтому для фурье-образов полей

по времени можно написать ( $\mathbf{R}_{ab} \equiv \mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b$ ):

$$E_i^{\text{mic}}(\mathbf{R}_a, \omega) = E_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) + \frac{1}{2\pi^2} \sum_b \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \{ \alpha(\omega) + \delta\alpha^s(\omega) \} E_k^{\text{mic}}(\mathbf{R}_b, \omega) \times \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}), \quad (\text{П1})$$

где введено обозначение

$$Q_{is}(\mathbf{p}, \omega) = Q(p, \omega) t_{is} = \frac{p^2 \delta_{is} - p_i p_s}{p^2 - (\omega/c)^2}, \quad t_{is} \equiv \delta_{is} - p_i p_s p^{-2}. \quad (\text{П2})$$

Формирование локального поля происходит с участием многих молекул. Естественно, что влияние близких молекул сильнее, чем далеких, так что основной вклад вносят молекулы, лежащие в некотором объеме с линейным размером  $d$  вблизи рассматриваемой молекулы. Если длина волны поля  $\lambda$  намного больше среднего межмолекулярного расстояния  $n_0^{-1/3}$ , то выполняется неравенство

$$\lambda \gg d \gg n_0^{-1/3}. \quad (\text{П3})$$

В этом случае в процессе формирования локального поля происходит взаимопогашение полей многих молекул, так что значение действующего на молекулу микроскопического поля близко к усредненному по координатам остальных молекул значению этого поля. Поэтому под знаками суммы и интеграла в (П1) можно заменить  $E_k^{\text{mic}}(\mathbf{R}_b, \omega)$  величиной « $E_k^{\text{mic}}(\mathbf{R}_b, \omega)$ » =  $E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) + \delta E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega)$ , после чего (П1) принимает вид

$$E_i^{\text{mic}}(\mathbf{R}_b, \omega) = E_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) + \frac{1}{2\pi^2} \sum_b \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \{ \alpha(\omega) + \delta\alpha^s(\omega) \} \times \{ E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) + \delta E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) \} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}). \quad (\text{П4})$$

Усреднение этого уравнения по координатам всех остальных молекул и флуктуациям поляризуемостей позволяет получить уравнение для локального поля:

$$E_i^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) = E_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) + \frac{1}{2\pi^2} \left\langle \left\langle \sum_b \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \{ \alpha(\omega) E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) + \delta\alpha^s(\omega) \delta E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) \} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}) \right\rangle \right\rangle. \quad (\text{П5})$$

Умножив (П4) на  $\delta\alpha^s(\omega)$  и усреднив полученное уравнение по координатам остальных молекул и флуктуациям

поляризуемостей, легко получить

$$F_i(\mathbf{R}_a, \omega) = \langle \delta\alpha^s(\omega) \delta\alpha^s(\omega) \rangle \times \frac{1}{2\pi^2} \left\langle \left\langle \sum_b \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}) \right\rangle \right\rangle + \frac{1}{2\pi^2} \alpha(\omega) \left\langle \left\langle \sum_b \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) F_k(\mathbf{R}_b, \omega) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}) \right\rangle \right\rangle. \quad (\text{П6})$$

Для уравнения сумм по координатам молекул в (П5) и (П6) достаточно умножить каждое слагаемое на вероятность положения молекулы в элементе объема  $dV'$  на расстоянии  $R_{ab} = |\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b|$  от рассматриваемой молекулы

$$dw(\mathbf{R}_{ab}) = g(\mathbf{R}_{ab})(dV'/V) = \{ 1 - f(\mathbf{R}_{ab}) \} (dV'/V) \quad (\text{П7})$$

и проинтегрировать по  $\mathbf{R}_{ab}$ . В результате зависимость слагаемых от  $R_b$  исчезает и суммирование сводится к умножению на число членов сумм  $N-1 \approx N$ . Величина  $g(R_{ab})$  называется обычно радиальной функцией распределения и может быть измерена в независимом эксперименте, например, по дифракции рентгеновских лучей [4].

Учитывая сказанное, результат усреднения (П5) по пространственному расположению координат центров инерции молекул можно представить как

$$E_i^{\text{loc}}(\mathbf{R}_a, \omega) = E_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) + \frac{n_0}{2\pi^2} \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \int d^3 R_{ab} [1 - f(R_{ab})] \times \{ \alpha(\omega) E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) + F_k(\mathbf{R}_b, \omega) \} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}). \quad (\text{П8})$$

Аналогичным образом можно представить результат усреднения (П6) по координатам молекул

$$F_i(\mathbf{R}_a, \omega) = F_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) + \frac{n_0 \alpha(\omega)}{2\pi^2} \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \times \int d^3 R_{ab} [1 - f(R_{ab})] F_k(\mathbf{R}_b, \omega) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}), \quad (\text{П9})$$

где использовано обозначение

$$F_i^0(\mathbf{R}_a, \omega) = \langle \delta\alpha^s(\omega) \delta\alpha^s(\omega) \rangle \left\{ \frac{n_0}{2\pi^2} \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \times \int d^3 R_{ab} E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}) - \frac{n_0}{2\pi^2} \int d^3 p Q_{ik}(\mathbf{p}, \omega) \times \int d^3 R_{ab} f(R_{ab}) E_k^{\text{loc}}(\mathbf{R}_b, \omega) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}) \right\}. \quad (\text{П10})$$

Рассмотрим теперь интеграл по  $\mathbf{R}_{ab}$  в (П10), содержащий функцию  $f(\mathbf{R}_{ab})$ . Так как радиальная функция распределения обращается в нуль при  $R_{ab} \ll n_0^{-1/3}$  из-за

исчезающе малой вероятности неограниченного сближения двух молекул, то  $f(\mathbf{R}_{ab}) = 1$  при  $R_{ab} \ll n_0^{-1/3}$ . С другой стороны, корреляция далеких молекул отсутствует, поэтому  $f(\mathbf{R}_{ab}) = 0$  при  $R_{ab} \gg n_0^{-1/3}$ . Таким образом, функция  $f(\mathbf{R}_{ab})$  отлична от нуля, только когда  $R_{ab}$  порядка среднего межмолекулярного расстояния  $n_0^{-1/3}$ . Локальное поле существенно меняется на расстояниях порядка длины волны, значительно меньших, чем  $n_0^{-1/3}$ . Это значит, что локальное поле практически не изменяется в определяющей величину интеграла области интегрирования, и поле можно вынести из-под знака интеграла. После этого удобно перейти к фурье-образам полей по координатам, получив вместо (П10)

$$F_i^0(\mathbf{q}, \omega) = h(\omega) \{ (Q - J)t_{ik} - Ll_{ik} \} E_k^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{П11})$$

где

$$h(\omega) = 4\pi n_0 \langle \delta\alpha^s(\omega) \delta\alpha^s(\omega) \rangle = 4\pi n_0 \delta\alpha_{\text{sq}}^2. \quad (\text{П12})$$

$$\begin{aligned} J_{ik}(\mathbf{q}, \omega) &= \int d^3p Q_{ik}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega) f(-\mathbf{p}) \\ &= J(q, \omega)t_{is} + L(q, \omega)l_{is}, \end{aligned} \quad (\text{П13})$$

$$f(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-3} \int d^3R_{ab} f(\mathbf{R}_{ab}) \exp\{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ab}\}.$$

Рассматривая однородный изотропный диэлектрик, учтем, что в такой среде функция  $f(\mathbf{R}_{ab})$  должна быть сферически симметричной,  $f(\mathbf{p}) = f(p)$ . В случае, когда длина волны поля велика по сравнению с межатомным расстоянием, величины  $qn_0^{-1/3}$  и  $(\omega/c)n_0^{-1/3}$  малы. Если ограничиться учетом слагаемых второго порядка по этим величинам, то интеграл (П13) имеет вид

$$\begin{aligned} J_{is}(\mathbf{q}, \omega) &= \int d^3p Q_{is}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \omega) f(\mathbf{p}) \\ &= (2/3 + A)t_{is} + (2/3 + B)l_{is}, \end{aligned} \quad (\text{П14})$$

где коэффициенты  $A$  и  $B$  зависят от конкретного вида радиальной функции распределения и определяются равенствами [5]:

$$\begin{aligned} A &= \{ (2\omega^2/3c^2) + (q^2/15) \} K; \\ B &= \{ (2\omega^2/3c^2) - (2q^2/15) \} K; \\ K &= \int d^3p f(p)(1/p^2). \end{aligned} \quad (\text{П15})$$

Переход к фурье-образам полей по координатам в (П9) дает

$$\begin{aligned} F_i(\mathbf{q}, \omega) &= \{ [1 - 4\pi n_0 \alpha(\omega)(Q - J)]^{-1} t_{ik} \\ &+ [1 + 4\pi n_0 \alpha(\omega)L]^{-1} l_{ik} \} F_k^0(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (\text{П16})$$

Подстановка (П11) в (П16) приводит к искомому соотношению для  $F_i(\mathbf{q}, \omega)$ :

$$\begin{aligned} F_i(\mathbf{q}, \omega) &= h(\omega) \{ (Q - J)[1 - 4\pi n_0 \alpha(\omega)(Q - J)]^{-1} t_{ik} \\ &- L[1 + 4\pi n_0 \alpha(\omega)L]^{-1} l_{ik} \} E_k^{\text{loc}}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (\text{П17})$$

## Список литературы

- [1] Сканиви Г.И. Физика диэлектриков. Т. 2. М., 1949. 500 с.
- [2] Волькенштейн М.В. Молекулярная оптика. М., 1951. 744 с.
- [3] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Нью-Йорк, 1978. 791 с.
- [4] Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М., 1967. 336 с.
- [5] Дубовик В.М., Рязанов М.И. // Laser Physics. 2004. Vol. 14. N 6. P. 904-909.