

где $n_{ec} = m\omega^2 / (4\pi e^2)$, r — радиус канала, v_{eff} — эффективная частота столкновений электрон—нейтральный атом. Тогда при $r \sim 0,1$ мм, $n_{ec} \sim 2 \cdot 10^{12}$ см⁻³, $v_{eff} \sim 10^{12}$ с⁻¹, $n_e < 2,5 \cdot 10^{15}$ см⁻³, что близко к экспериментально зарегистрированной величине.

Измеренная величина концентрации электронов является интегральной по времени и средней по сечению канала стимулированного СВЧ разряда. Определение локального значения концентрации электронов, особенно при атмосферном давлении, когда диаметр канала $\sim 0,1$ мм, с помощью преобразования Абея является сложной экспериментальной задачей и в данной серии экспериментов не проводилось. Предварительные результаты по измерению временного хода $n_e(t)$ показали, что в течение СВЧ импульса длительностью 25 мкс концентрация электронов постоянна.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Батанов Г. М. и др. // Тр. ФИАН СССР. 1985. 160. С. 174—203. [2] Гуревич А. В. // УФН. 1980. 132, № 4. С. 685—805. [3] Булкин П. С., Солнцев Г. С., Двинин С. А., Шкрадюк И. Э. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3, Физ. Астрон. 1986. 27, № 5. С. 15—21. [4] Методы исследования плазмы / Ред. В. Лохте-Хольтгревен. М., 1971. [5] Волкова Л. М., Девятов А. М., Шибков В. М., Шибкова Л. В. // Физика плазмы. 1981. 7, № 2. С. 296—302.

Поступила в редакцию
20.04.87

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 1

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 621.315.592

К РАСЧЕТУ ЭФФЕКТА ФАРАДЕЯ НА БЕНЗОЛЕ ПО МЕТОДУ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

М. Ю. Николаев, С. С. Семенов

(кафедра магнетизма)

Сделан точный (в рамках металлической модели) расчет недиагональных компонент тензоров проводимости и поляризуемости молекулы бензола, знание которых в свою очередь позволяет определить эффект Фарадея.

Металлическая модель молекулы неоднократно применялась к расчету основных характеристик молекул — частот электронных переходов, сил осцилляторов [1], поляризуемостей [2], интенсивностей комбинационных спектров [3], анизотропии диамагнитной восприимчивости [4, 5]. В основе этой модели лежит представление о свободном передвижении π -электронов вдоль цепочки сопряженных связей.

В данной заметке предпринята попытка теоретически рассчитать угол поворота плоскости поляризации света в магнитном поле (эффект Фарадея). Будем исходить из того, что шесть π -электронов бензола способны свободно передвигаться по периметру молекулы. Тем самым молекула представляется одномерным замкнутым потенциальным ящиком. Без потери общности шестиугольник бензола можно заменить окружностью с радиусом $R = 6 \cdot 1,34 \text{ \AA} / (2\pi)$ [5]. Уравнение Шрёдингера для свободного электрона в магнитном поле, перпендикулярном к плоскости молекул, имеет вид

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_{вн} \right)^2 \Phi = E\Phi, \quad (1)$$

$$\mathbf{A}_{вн} = \left(-\frac{yH_1}{2}, \frac{xH_1}{2}, 0 \right),$$

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}_{вн}.$$

Можно показать, что составляющая магнитного поля H_2 , лежащая в плоскости молекулы, не вносит вклада в рассматриваемый эффект (свет распространяется вдоль оси OZ). Если ввести полярный угол φ , то уравнение (1) можно переписать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{ie\hbar H_1}{2m} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} + \frac{e^2}{8mc^2} H_1^2 R^2 \Phi = E\Phi. \quad (2)$$

Решения уравнения (2) имеют вид

$$\Phi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi n},$$

$$E_{n1} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} - \frac{eH_1 n}{2mc} + \frac{e^2 H_1^2 R^2}{8mc^2}, \quad (3)$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Как видно из (3), собственные значения не вырождены по отношению к знаку n (эффект Зеемана на плоскости).

Известно, что вычисление недиагональных компонент тензоров поляризуемости α_1 и проводимости σ_1 , определяющих эффект Фарадея, сводится к нахождению наведенных в среде внешним электромагнитным полем токов [6, 7]. Гамильтониан электрона в поле световой волны имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}^0 + \widehat{\mathcal{H}}^1,$$

$$\widehat{\mathcal{H}}^0 = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2,$$

$$\widehat{\mathcal{H}}^1 = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} p,$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал поля световой волны, $\widehat{\mathcal{H}}^1$ — оператор взаимодействия электрона с электромагнитной волной, рассматриваемый как возмущение к $\widehat{\mathcal{H}}^0$. Решения уравнения $\widehat{\mathcal{H}}^0 \Phi_n = E_n \Phi_n$ предполагаются известными. Решая уравнение $i\hbar \partial \psi / \partial t = \widehat{\mathcal{H}} \psi$ по теории возмущений, можно найти среднее значение плотности тока:

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \sum_{m,n} \sum \Phi_m^* \Phi_n - \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c} \sum_{m,n} \int \left\{ f_{mn}^+ (\Phi_n^* \nabla \Phi_m - \Phi_m \nabla \Phi_n^*) \int \Phi_m^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Phi_n dV + \text{к. с.} \right\} dV - \frac{ie^2 \hbar}{4m^2 c} \sum_{m,n} \int \left\{ f_{mn}^- (\Phi_n^* \nabla \Phi_m - \Phi_m \nabla \Phi_n^*) \int \Phi_m^* \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} dV - \text{к. с.} \right\} dV, \quad (4)$$

$$f_{mn}^{\pm} = \left[\frac{P}{\omega_{mn} - \omega} + i\pi \delta(\omega_{mn} - \omega) \right] \pm \frac{P}{\omega_{mn} + \omega},$$

Φ_n — решение уравнения (1), P — символ главного значения. Интегрирование ведется по всему пространству. Сравнивая (4) с плотностью тока по классической теории, можно определить α_1 и σ_1 :

$$\mathbf{j}_{\text{кл}} = [\alpha] \frac{\omega^2}{c} \mathbf{A} - \frac{[\sigma]}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t},$$

$$\alpha_1 = -\frac{e^2 \hbar}{4m^2 \omega^2} \sum_{m,n} \int \left\{ f_{mn}^+ \left(\Phi_n^* \frac{\partial \Phi_m}{\partial x} - \Phi_m \frac{\partial \Phi_n^*}{\partial x} \right) \int \Phi_n^* \frac{\partial \Phi_m}{\partial y} dV + \text{к. с.} \right\} dV,$$

$$\sigma_1 = -\frac{ie^2 \hbar}{4m^2 \omega} \sum_{m,n} \int \left\{ f_{mn}^- \left(\Phi_n^* \frac{\partial \Phi_m}{\partial x} - \Phi_m \frac{\partial \Phi_n^*}{\partial x} \right) \int \Phi_n^* \frac{\partial \Phi_m}{\partial y} dV - \text{к. с.} \right\} dV. \quad (5)$$

Знание α_1 и σ_1 в свою очередь, позволяет рассчитать угол поворота плоскости поляризации:

$$\varphi = \frac{1}{2} \frac{\omega z}{c} \operatorname{Re} (N_+ - N_-), \quad (6)$$

$$N_+ - N_- = (-4\pi) \frac{\sigma_1/\omega + i\alpha_1}{n - ik}$$

(ω — частота падающего света, n — показатель преломления, k — коэффициент поглощения, z — толщина слоя образца, c — скорость света).

В случае молекулы бензола интегралы, входящие в формулы (5), берутся элементарно ($dV = d\varphi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$), и для α_1 и σ_1 получаем:

1) вне полосы поглощения

$$\alpha_1 = 0,$$

$$\sigma_1 = - \frac{9e^2 \hbar^2 H_1}{4m^4 R^4 c (\omega_0^2 - \omega^2)^2};$$

2) в случае резонанса,

$$\alpha_1 = \mp \frac{3e^2 \hbar \pi}{8m^2 R^2 \omega_{mn}},$$

$$\sigma_1 = \pm \frac{3e^2 \hbar}{16m^2 R^2 \omega_{mn}}.$$

Мы положили $k=0$ и учли в формулах (5) единственно разрешенный правилами отбора переход $\pm 1 \rightarrow \pm 2$ ($\omega_0 = 9,6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$). Окончательно после усреднения по всевозможным ориентациям бензольных колец ($H_1 = H \cos \theta$, $0 \leq \theta \leq \pi/2$) получаем:

$$\varphi = \frac{9e^2 \hbar^2 N_1 z H}{8m^4 R^4 c n (\omega_0^2 - \omega^2)^2} \quad (\text{вдали от резонанса}), \quad (7)$$

$$\varphi = \pm \frac{3\pi e^2 \hbar z N_1}{4m^2 R^2 c n} \quad (\text{резонанс})$$

($N_1 = 6,8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ — число Лошмидта). В работе [8] измерена постоянная Верде на длине волны 580 нм: $V_{\text{эксп}} = 4,15 \text{ угл. мин}/(\text{Э} \cdot \text{см})$. Формула (7) для этой же длины волны даст значение $V = \varphi/(zH) = 4,32 \text{ угл. мин}/(\text{Э} \cdot \text{см})$. Согласие экспериментальных и теоретических значений является вполне удовлетворительным, это свидетельствует о том, что примененная для расчета модель, основанная на представлении о свободном передвижении π -электронов в молекуле бензола, адекватно описывает не только оптические свойства и диамагнитную восприимчивость этой молекулы, но и такой тонкий магнетооптический эффект, каким является эффект Фарадея. Поэтому можно с определенностью утверждать, что π -электронные состояния в бензоле являются полностью делокализованными в пределах бензольного кольца.

Авторы глубоко благодарны профессору Е. И. Кондорскому за внимание и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Рекашева Т. Н. // Журн. физ. химии. 1954. 28. С. 1129—1131. [2] Адамов М. Н., Орлов Б. И. // Вестн. ЛГУ. Сер. физ. и хим. 1954. № 22. С. 182—184. [3] Волькенштейн М. В., Языкова С. М. // ДАН СССР. 1955. 104. С. 834—836. [4] Ребане Т. К. // ДАН СССР. 1957. 114. С. 70—73. [5] Волькенштейн М. В., Боровинский Л. А. // ДАН СССР. 1952. 85, № 5. С. 477—480. [6] Argués P. N. // Phys. Rev. 1955. 97. P. 334—336. [7] Кондорский Е. И. Зональная теория магнетизма. М., 1976. Ч. 1. [8] Villaverde A. V., Donatti D. A. // J. Chem. Phys. 1979. 71, N 10. P. 4021—4025.

Поступила в редакцию
16.02.87