POLITECHNIKA KRAKOWSKA im. Tadeusza Kościuszki

MAREK SIKOŃ

ANALIZA OŚRODKA COSSERATÓW NA PODSTAWIE ATOMOWEJ BUDOWY MATERII



SERIA MECHANIKA

MONOGRAFIA 419

PRZEWODNICZĄCY KOLEGIUM REDAKCYJNEGO WYDAWNICTWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ Jan Kazior

PRZEWODNICZĄCY KOLEGIUM REDAKCYJNEGO WYDAWNICTW NAUKOWYCH Józef Nizioł

REDAKTOR SERII Rafał Palej

REDAKTOR NAUKOWY Jerzy Sanetra

RECENZENCI Ryszard B. Pęcherski, Gwidon Szefer

SEKRETARZ SEKCJI Marta Wlazło

SKŁAD I ŁAMANIE Anna Pawlik

PROJEKT OKŁADKI Jadwiga Mączka

© Copyright by Politechnika Krakowska, Kraków 2012

© Copyright by Marek Sikoń, Kraków 2012

ISSN 0860-097X

> Druk i oprawę wykonano w Dziale Poligrafii Politechniki Krakowskiej. Ark. wyd. 6,00.

Zam. 27/2013

Nakład 200 egz.

Cena zł 21,00 z VAT

Spis treści

Wa	iżniejsze oznaczenia	5
Ws	stęp	9
1. Cel pracy		
	1.1. Naprężenie momentowe	11
	1.2. Obroty w niesymetrycznej sprężystości	12
	1.3. Obroty Cosseratów w układzie atomów	12
2.	Modele atomu a obroty Cosseratów	14
3. Opis klasyczny – wprowadzenie do dynamiki molekularnej Cosseratów		
	3.1. Układ jądro-chmura elektronowa w warunkach obciążenia	
	mechanicznego	18
	3.1.1. Obciążenie elektronu	18
	3.1.2. Obciążenie atomu	22
	3.1.3. Układ atomów	24
	3.1.4. Równania Hamiltona dla układu atomów	28
	3.1.5. Energia potencjalna oddziaływań momentowych	29
	3.1.6. Uzupełnienie operatora Hamiltona	30
	3.1.7. Uzupełnienie energii elektronowej molekuły wieloatomowej	31
	3.1.8. Okresowe własności oddziaływania momentowego	32
	3.2. Atomy ze środkiem masy obciążone mechanicznie	33
	3.2.1. Atom z jednym elektronem i jednym protonem	34
	3.2.2. Atom ze środkiem mas elektronów i nukleonów	37
	3.2.3. Układ atomów ze środkiem masy	42
4.	Opis kwantowy ośrodka Cosseratów	45
	4.1. Oddziaływanie momentowe	45
	4.2. Energia spinu	48
	4.3. Energia ruchu orbitalnego	49
	4.4. Pole magnetyczne	52
	4.5. Energia pola magnetycznego	53
5.	Analiza makroskopowych własności ośrodka Cosseratów na podstawie	
	rozkładu Boltzmanna	55
	5.1. Wartość oczekiwana oddziaływania momentowego	56
	5.1.1. Wektor naprężenia momentowego	58
	5.2. Wartość oczekiwana momentu pędu precesji	61
	5.3. Wartość oczekiwana kierunku precesji	62

	4
2	L
	•

6.	Makroskopowy opis polaryzacji mechanicznej ośrodka Cosseratów	64	
7.	Analogia do teorii niesymetrycznej sprężystości	66	
8.	Makromagnetyzacja ośrodka Cosseratów	71	
9.	Ośrodek Cosseratów w spektrometrze EPR	74	
	9.1. Stan hydrostatyczny	75	
	9.2. Moc absorpcji	76	
10.	Modelowanie ośrodka Cosseratów z obrotową (chiralną) dwójłomnością		
	wymuszoną	78	
	10.1. Uogólniony tensor przenikalności dielektrycznej	78	
	10.2. Równania materiałowe	78	
	10.3. Fala światła w ośrodku Cosseratów	79	
	10.4. Czysty stan naprężenia momentowego	86	
	10.5. Analiza w polaryskopie dla przechodzącej wiązki światła	88	
	10.6. Analiza w świetle rozproszonym	93	
	10.7. Układ równań do wyznaczenia składowych tensora naprężenia		
	momentowego	97	
11.	Analogia do zjawiska Faradaya i efektu Villariego	107	
12.	Siła Lorentza w ośrodku Cosseratów	111	
13.	Wnioski	112	
14.	Kierunki dalszych badań	114	
Lite	eratura	116	
Stre	Streszczenia		

Ważniejsze oznaczenia

P_k	_	siła obciążająca atom o numerze k,
$oldsymbol{M}_{\zeta_k}$	_	moment działający na elektron o numerze ζ_k ,
M_k	_	moment wynikający z niesymetrycznej budowy atomu $\boldsymbol{k},$
U_k^P	_	energia potencjalna oddziaływań siłowych atomu k,
U_k^M	_	energia potencjalna oddziaływań momentowych atomu $\boldsymbol{k},$
$\boldsymbol{\omega}_{\zeta_k}^{ ext{couple}}, \boldsymbol{\omega}_k^{ ext{couple}}$	_	prędkość kątowa precesji elektronu o numerze ζ_k oraz atomu $k,$
$\phi_{\zeta_k}^{\text{couple}}, \phi_k^{\text{couple}}$	_	kąt precesji elektronu o numerze ζ_k oraz atomu k,
$oldsymbol{s}_{\zeta_k},oldsymbol{l}_{\zeta_k},oldsymbol{j}_{\zeta_k}$	_	spinowy, orbitalny i całkowity moment pędu elektro-
		nu ζ_k ,
$\boldsymbol{S}_k, \boldsymbol{L}_k, \boldsymbol{J}_k$	_	spinowy, orbitalny i całkowity moment pędu atomu k,
Θ_{kl}	-	przyrost kąta precesji do odległości pomiędzy atomami k i $l,$
$n_{\zeta_k}, I_{\zeta_k}, s_{\zeta_k}, j_{\zeta_k}, \text{mech}_j$. —	główna, orbitalna, spinowa, całkowita i mechaniczna licz-
		ba kwantowa elektronu ζ_k ,
$L_k, S_k, J_k, mech_J$	_	orbitalna, spinowa, całkowita i mechaniczna liczba kwantowa atomu $\boldsymbol{k},$
$I_{S_{A_k}}^{s.m.}, I_{A_k}^{s.m.}$	_	spinowa i całkowita liczba kwantowa środka masy jądra,
Z_k^{Cosserat}	_	ilość elektronów walencyjnych atomu k,
$A_k^{ m Cosserat}$	_	ilość nukleonów na niezapełnionych powłokach jądro-wych,
$\boldsymbol{J}_{k}^{s.m.}$	_	moment pędu atomu k ze środkiem masy,
$\boldsymbol{M}_{k}^{s.m.}$	_	obciążenie momentowe atomu k ze środkiem masy,
\hat{M}_{k}^{s}	_	operator spinowego oddziaływania momentowego atomu $k,$

$\left(\hat{S}_{z}\right)_{k}$	– operator składowej spinowego momentu pędu atomu k,
$(\Phi^M_z)_k$	– funkcja falowa składowej momentu pędu atomu k,
$\Omega_k^{S_z} igg(\hat{S}_z igg)_k$	– składowa operatora \hat{M}_k^s w wyróżnionym kierunku,
$\mathbf{M}_{k}^{S_{z}}$	– wartość własna operatora \hat{M}_k^s atomu k w wyróżnionym kierunku,
$\hat{U}_k^{\ S}$	– operator energii spinu atomu k,
$(\omega_{S_z}^{\text{couple}}) \left(\hat{S}_z \right)_k$	– składowa operatora \hat{U}_k^s w wyróżnionym kierunku,
$(\mathbf{U}_z^S)_k$	– wartość własna operatora \hat{U}_k^s w wyróżnionym kierunku,
$(\Phi^U_z)_k$	 funkcja falowa energii potencjalnej atomu k w wy- różnionym kierunku,
$\boldsymbol{B}_{k}^{ ext{couple}}$	 wektor indukcji magnetycznej pochodzący od precesji atomu k,
B ^{couple}	 wektor indukcji magnetycznej naprężenia momento- wego,
$(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k$	 moment magnetyczny atomu k,
$\Pi(mech_J)$	 prawdopodobieństwo wystąpienia atomu o orientacji opisanej liczbą kwantową mech_J,
\mathbf{B}_{J}	 funkcja analogiczna do funkcji Brillouna,
$\mathbf{m}_V^{ ext{couple}}$	 wektor naprężenia momentowego w odniesieniu do jednostki objętości,
$\mathbf{m}_{h}^{\mathrm{couple}}$	 wektor naprężenia momentowego stanu hydrostatycz- nego,
\mathfrak{J}^{couple}	 makroskopowy wektor momentu pędu precesji na jed- nostkę objętości,
ϕ^{couple}	 makroskopowy obrót elementarnej objętości związany z naprężeniem momentowym,
g_k	– współczynnik rozszczepienia spektroskopowego,

G^{couple}	 magnetyzacja ośrodka Cosseratów w odniesieniu do jednostki objętości V,
Γ	 kąt skręcenia azymutu polaryzacji światła,
a_{ij}	 tensor skręcenia optycznego,
θ	 wektor skręcenia optycznego,
Ψ	 opóźnienie fazowe fali światła,
Δ	 droga geometryczna fali światła,
$x^{(k)}$	 – oznaczenie kierunku przechodzenia światła,
$(k) = 1, 2, 3, \dots$	 numeracja kierunku przechodzenia światła,
Ι	 natężenie światła,
β_{ij}	 stała optyczno-mechaniczna,
V	– stała Verdeta.

Wstęp

W prezentowanej pracy starano się wykazać, że elektrony położone na nieobsadzonych w pełni powłokach atomu, decydujące o własnościach chemicznych pierwiastka, a także nukleony na niezapełnionych powłokach jądrowych wpływają na własności mechaniczne w postaci oddziaływania momentowego powstającego w polu wywołanym mechaniczną zmianą odległości między atomami. Oddziaływania momentowe rozpatrywane w bilionach molekuł ujawniają się na poziomie continuum w postaci naprężenia momentowego.

Ośrodek, w którym transmisja stanu mechanicznego przez element powierzchni umieszczony wewnątrz ośrodka odbywa się w wyniku działania nie tylko wektora siły, ale dodatkowo wektora momentu nazywany jest w mechanice ciała stałego ośrodkiem Cosseratów. Ośrodek z oddziaływaniami momentowymi opisano po raz pierwszy w pracy [71], rozwinięto w pracy [16] i między innymi w pracy [43]. W ośrodkach Cosseratów występują naprężenia siłowe i momentowe. Tensor naprężenia w ośrodkach Cosseratów jest niesymetryczny.

Teoria Cosseratów nie ma pełnej weryfikacji doświadczalnej. Dotychczas opracowano metody pozwalające na wyznaczenie stałych materiałowych Cosseratów [39]. W metodach tych znalazły zastosowanie zjawiska wywołane tzw. efektem skali. Dzięki znajomości stałych materiałowych rozwiązania teoretyczne Cosseratów mogą być przedstawione w sposób kompletny. Jednak aby otrzymać rozwiązania doświadczalne, w dalszym ciągu poszukiwane są zjawiska, gdzie naprężenie momentowe opisane byłoby przez jakiś parametr fizyczny. Współczesne metody mechaniki eksperymentalnej bazują na zjawiskach opisywanych jedynie przez naprężenie siłowe.

W prezentowanej pracy poszukuje się rozwiązania postawionego problemu na poziomie atomowej budowy materii. Zwrócono uwagę na atomy, w których środek masy nie pokrywa się ze środkiem wynikającym z działania sił kulombowskich. Niesymetria ta powoduje powstanie ramienia oddziaływania dla sił międzyatomowych i powstanie momentu zaburzającego ruch elektronów/nukleonów. Zaburzenie to jest poszukiwanym zjawiskiem fizycznym, które stanowi w tej pracy podstawę do wyznaczenia naprężenia momentowego w sposób eksperymentalny.

Wskazano na możliwość prowadzenia analizy w sposób klasyczny za pomocą metod dynamiki molekularnej, gdzie atom traktuje się jak kulkę (punkt materialny) posiadającą moment pędu.

Spośród metod doświadczalnych wyróżniono metody spektrometrii rezonansowej oraz metody, w których narzędziem pomiarowym jest światło. Badania te poprzedzono opisem kwantowym ośrodka Cosseratów. Przedstawiono parametry fizyczne nanoskali związane z oddziaływaniami momentowymi i na bazie tych parametrów zaproponowano doświadczenie w spektrometrze EPR. Charakter widm rezonansowych otrzymanych w spektrometrze EPR dla kryształków siarczanu miedzi obciążonych w postaci hydrostatycznego ściskania jest zgodny z modelem teoretycznym [55, 60–62].

Podjęto próbę opisu makroskopowych własności ośrodka Cosseratów na podstawie rozkładu Boltzmanna, gdzie populację atomów w polu oddziaływań mechanicznych przedstawiono w funkcji mechanicznej liczby kwantowej. Taki sposób analizy dla pola magnetycznego i magnetycznej liczby kwantowej był już stosowany [33] i w niniejszej pracy wzorowano się na tej metodzie.

Własności optyczne ośrodka Cosseratów opisano na podstawie modelu z obrotową dwójłomnością wymuszoną. W modelu tym rozdzielone oddziaływaniem momentowym fale światła mają cechy symetrii chiralnej. Aktualnie nie jest znana teoria wpływu czynnika mechanicznego na obrotową (chiralną) dwójłomność wymuszoną i opis ten jest próbą uzupełnienia stanu wiedzy w tym zakresie.

W pracy przedstawiono metodę elastooptyczną wyznaczenia wszystkich składowych tensora naprężenia momentowego niezależnie od rozwiązań analitycznych i numerycznych. Zebranie danych pomiarowych umożliwia stanowisko doświadczalne opisane przez autora w formie patentu opublikowanego przez Urząd Patentowy Rzeczypospolitej Polskiej [63].

Wskazano na możliwości dalszych badań zarówno teoretycznych, jak i doświadczalnych.

1. Cel pracy

1.1. Naprężenie momentowe

W teorii sprężystości wydziela się z obciążonego mechanicznie ciała objętość *V'* ograniczoną powierzchnią *A'* (rys. 1). Dalej rozpatruje się transmisję stanu mechanicznego przez dowolny element *dA* leżący na powierzchni *A'*. Transmisję taką opisuje na poziomie makroskopowym siła $d\mathbf{P} = \mathbf{p}dA$ i dodatkowo w niesymetrycznej sprężystości [43] moment $d\mathbf{M} = \mathbf{m}dA$. Wielkości $\mathbf{p}(\mathbf{p}^{(x)}, \mathbf{p}^{(y)}, \mathbf{p}^{(z)})$ oraz $\mathbf{m}(\mathbf{m}^{(x)}, \mathbf{m}^{(y)}, \mathbf{m}^{(z)})$ to odpowiednio wektory naprężenia siłowego i momentowego, a składowe tych wektorów: $\mathbf{p}^{(x)} \equiv (\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}), \mathbf{p}^{(y)} \equiv (\sigma_{yx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}), \mathbf{p}^{(z)} \equiv (\sigma_{zx}, \sigma_{zy}, \sigma_{zz}),$ oraz $\mathbf{m}^{(x)} \equiv (\mu_{xx}, \mu_{xy}, \mu_{xz}), \mathbf{m}^{(y)} \equiv (\mu_{yx}, \mu_{yy}, \mu_{yz}), \mathbf{m}^{(z)} \equiv (\mu_{zx}, \mu_{zy}, \mu_{zz})$ to odpowiednio naprężenia siłowe i momentowe.



Rys. 1. Transmisja stanu mechanicznego przez element powierzchni dA ośrodka Cosseratów

Wektory naprężenia siłowego i momentowego definiuje się wg wzorów:

$$\mathbf{p} = \lim_{dA \to 0} \frac{d\mathbf{P}}{dA} \tag{1}$$

$$\mathbf{m} = \lim_{dA \to 0} \frac{dM}{dA} \tag{2}$$

1.2. Obroty w niesymetrycznej sprężystości

Na rysunku 2 przedstawiono deformacje elementarnego prostopadłościanu dV(w rzucie na płaszczyznę (xy)). Obrót wywołany wektorem przemieszczenia u zapisuje się wg wzoru:

$$\widehat{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2} rot \boldsymbol{u} \tag{3}$$

Obrót (3) może prowadzić do powstania naprężeń niesymetrycznych σ_{ii} , μ_{ii} , i, j, k = x, y, z, a teorie opisującą powstawanie takich naprężeń nazywamy teoria niesymetrycznej sprężystości w ośrodku pseudo-continuum Cosseratów [43].



nu wywołana wektorem przemieszczeń u

Rys. 2. Deformacja elementarnego prostopadłościa- Rys. 3. Deformacja elementarnego prostopadłościanu z uwzględnieniem obrotu Cosseratów ϕ

W teorii niesymetrycznej sprężystości [43] i sprężystości mikropolarnej [18] wprowadza się dodatkowo obrót ϕ (rys. 3). Obrót ten będziemy nazywać obrotem Cosseratów. Obrót $\hat{\omega}$ ma swoje odniesienie do wektora przemieszczenia \boldsymbol{u} , natomiast interpretacja fizyczna obrotu $\boldsymbol{\varphi}$ nie jest znana.

1.3. Obroty Cosseratów w układzie atomów

Opisując układ atomów jak na rys. 4, wprowadza się w teorii sprężystości mikropolarnej [18] mikrorotacje atomów składowych φ_z^1 , φ_z^2 , φ_z^3 , φ_z^4 . Deformację takiego układu opisuje się podobnie jak to przedstawiono na rys. 2 i 3, z ta różnica, że obrót φ układu atomów będziemy traktować jako wypadkową obrotów atomów składowych. Mikrorotacje wprowadza się bez fizycznych podstaw takiego ruchu.



Rys. 4. Deformacja kryształu

Celem niniejszej monografii jest podanie sensu fizycznego obrotu φ i mikrorotacji φ_k , k = 1, 2, 3, ..., N, i na tej podstawie opracowanie metody doświadczalnego pomiaru naprężenia momentowego.

2. Modele atomu a obroty Cosseratów

Teoria Cosseratów powstała w roku 1909 [71]. Na podstawie obowiazującego w tym czasie modelu atomu Thomsona (zwanego ciastem z rodzynkami, 1904) nie było możliwości wprowadzenia parametrów fizycznych, które mogłyby nawiązywać do teorii Cosseratów. Okazuje się, że poprzedni model, w postaci sprężystej kuli bilardowej (model Daltona, 1808), po uzupełnieniu zbioru takich kul przez dwuatomowy potencjał, stosowany jest współcześnie w dynamice molekularnej. Na potrzeby Cosseratów, kiedy celem jest opisanie obrotu atomu, model kuli bilardowej należałoby zaopatrzyć w kierunek, od którego taki obrót można by odmierzyć. Uzasadnienie takiego kierunku znajdziemy poprzez wprowadzenie planetarnego modelu Rutherforda (1911) do klasycznego modelu atomu Bohra (1913) w postaci wektora momentu pedu atomu. W modelu Bohra, w którym elektrony umieszczone sa na orbitach w pewnej odległości od jądra, możemy wprowadzić oddziaływanie momentowe poprzez redukcję siły międzyatomowej działającej centralnie do chwilowego położenia elektronu. Ramię oddziaływania momentowego otrzymamy dla elektronów na kolejnych powłokach jako wielokrotność (główna liczba kwantowa podniesiona do kwadratu) promienia Bohra. Oddziaływanie momentowe powoduje precesję orbit elektronowych, a więc geometryczne zaburzenie w ruchu atomu. Kąt precesji mierzony od kierunku wyznaczonego przez wektor momentu pedu bedziemy traktować jako poszukiwana miarę obrotu atomu. Obroty takie zsumowane statystycznie po wszystkich atomach w elementarnej objętości będą prowadzić do kontynualnego obrotu Cosseratów, a oddziaływania momentowe do naprężenia momentowego.

Z punktu widzenia rozpatrywanego problemu interesujący jest występujący współcześnie w fizyce model atomu ze środkiem masy. Jest to atom z jednym elektronem i jądrem w postaci jednego protonu, gdzie zarówno elektron, jak i jądro krążą wokół ich wspólnego środka masy. W takim modelu siła oddziaływania międzyatomowego będzie przyłożona w środku masy atomu. Dokonując redukcji obciążenia atomu do chwilowego położenia jądra, możemy wyróżnić dodatkowo oddziaływanie momentowe jądrowe oraz precesję jądra. Kąt precesji jądra będzie dodatkowym kątem obrotu atomu w procesie generowania naprężenia momentowego.

W prezentowanej pracy zaproponowano rozszerzenie tego modelu na cały układ elektronowo-nukleonowy. W takim modelu wyróżniono trzy istotne z punktu widzenia mechaniki punkty atomu: środek masy elektronów, środek masy nukleonów i środek masy całego atomu. Siła oddziaływania międzyatomowego będzie działać w środku masy całego atomu a redukcję tej siły będziemy dokonywać odpowiednio do środków mas elektronów i nukleonów, otrzymując w ten sposób oddziaływanie momentowe elektronowe i nukleonowe.

W pracy badane są atomy o budowie niesymetrycznej, gdzie elektrony/nukleony nie wypełniają całkowicie swoich powłok. Niesymetrię z uwagi na wypełnienie powłok wywołują zarówno elektrony, jak i nukleony. Atom może więc nie wykazywać oddziaływań momentowych ze względu na elektrony, ale posiadać oddziaływania momentowe jądrowe i odwrotnie. Okazuje się że stochastyczne fluktuacje chmury elektronów całkowicie wypełniających powłoki również będą prowadzić do oddziaływań momentowych w postaci sił van der Waalsa działających na promieniu równym odległości środka masy asymetrycznie rozmieszczonych elektronów względem jądra.

Oddziaływania momentowe powodują zmianę kształtu powłok. Sprzężenie pomiędzy powłokami elektronowymi, prowadzące do zniekształcenia sferycznych kształtów powłok, jest opisywane między innymi w pracach [19, 26]. Autorzy nie rozwijają jednak opisu na gruncie mechaniki, ale koncentrują się na objaśnieniu zaburzenia ładunków elektrycznych, które prowadzi do powstania elektrycznego momentu dipolowego. Wprowadzony dalej moment gęstości stanów również nie jest przedstawiany z punktu widzenia mechaniki, autorzy nie rozstrzygają więc wpływu asymetrii gęstości elektronów na stan mechaniczny atomu.

Mimo wad i ograniczeń klasyczny model atomu nadal jest stosowany przez fizyków [23]. Okazuje się że dla atomów o dużych promieniach orbit (np. dla atomów rydbergowskich, opisanych w dalszej części pracy) opis klasyczny wykazuje zgodność z opisem kwantowym i sprawdza się z wynikami badań doświadczalnych [24].

Rozwój fizyki zaowocował powstaniem modelu atomu nazywanego atomem Schrödingera (1926). Kształt atomu Schrödingera opisuje funkcja zmiennych położenia o wartościach zespolonych zwana funkcją falową lub orbitalem. Orbital wynika z rozwiazania równania Schrödingera dla szczególnego przypadku jednego elektronu znajdujacego się na jednej powłoce atomowej. Kształt orbitali zależy od położenia elektronu względem jądra oraz innych elektronów. Położenia te wynikają z liczb kwantowych (konfiguracja elektronowa) przypisanych każdemu elektronowi. Wartość funkcji falowej nazywamy amplitudą prawdopodobieństwa, a kwadrat modułu funkcji falowej opisuje gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danej przestrzeni. Funkcja falowa nie jest bezpośrednio mierzalna. Poszukiwanie elektronu na orbitalach nie daje więc szansy doświadczalnego potwierdzenia obliczeń teoretycznych. Rozwiązanie równania Schrödingera może być przeprowadzone dla energii elektronu (zaburzonej polem mechanicznym) wyrażonej przez prędkość kątową zaburzenia (analogia do precesji orbit elektronowych w modelu atomu Bohra). Predkość katowa można mierzyć w spektrometrze EPR. Dla nukleonów analogiczne zaburzenie może być badane w spektrometrze NMR.

Współczesną propozycją jest model atomu, w którym kształt orbitali wyznaczany jest również na podstawie równania Schrödingera, ale ze względu na trudności w rozwiązaniu tego równania dla większej ilości elektronów wprowadza się przybliżenie jednoelektronowe całego układu. W zależności od rodzaju tego przybliżenia możemy mówić o modelu atomu Hartreego-Focka (1928, gdzie wieloelektronowa funkcja falowa sprowadzona jest do tzw. wyznacznika Slatera utworzonego z jednoelektronowych spinorbitali) lub modelu atomu Kohna-Shama (1956, gdzie funkcję falową stanu podstawowego traktuje się na równi z gęstością elektronową stanu podstawowego). Ponieważ gęstość elektronów jest wielkością mierzalną w krystalografii (metoda rentgenografii strukturalnej), otrzymane wyniki można będzie potwierdzić doświadczalnie.

Należy wspomnieć również o modelu atomu Gryzinskiego (1965), gdzie elektron porusza się po trajektorii nazwanej przez autora radiolą. Radiola jest miejscem geometrycznym kolejnych położeń elektronu, który na skutek sił kulombowskich spada na jądro, po czym w wyniku oddziaływań pomiędzy momentami magnetycznymi elektronu i jądra (siła Lorentza) jest odpychany od jądra i w efekcie ruch elektronu powtarza się. W takim atomie oddziaływania momentowe będą zmienne w zależności od zmian położenia elektronu na radioli. Atom taki nie ma własności kwantowych będących podstawą interpretacji wyników w spektrometrze EPR. Na podstawie modelu atomu Gryzinskiego nie mamy również możliwości opisu własności optycznych ośrodka Cosseratów, co wykonano w niniejszej monografii wg powszechnie uznanego stanu wiedzy.

Okazuje się, że ruch elektronu może być opisany nie tylko działaniem potencjału dwuatomowego. Współcześnie opracowano teorię pasmową własności elektronowych ciał stałych [35], gdzie opisuje się w sposób kwantowo-mechaniczny zachowanie się elektronów w krystalicznym ciele stałym. Według tej teorii oddziaływania elektronu w krysztale (przyciąganie przez jądra atomów i odpychanie przez inne elektrony) można opisać za pomocą potencjału periodycznego. Potencjał ten jest wspólny dla wszystkich elektronów i przez to stany elektronowe opisuje się za pomocą jednoelektronowych funkcji falowych. W teorii tej rozwiązuje się tzw. efektywne równanie Schrödingera. Jest to równanie Schrödingera z potencjałem periodycznym, do którego podstawia się funkcję Blocha (jako ogólną postać funkcji falowej przedstawionej w postaci iloczynu zespolonej fali płaskiej i funkcji periodycznej). Teoria pasmowa własności elektronowych ciał stałych daje szansę sprzężenia analizy na poziomie elektronowym i na poziomie kryształu.

W pracach dotyczących badań na poziomie atomowym panuje pogląd, że nie jest celem analizy w skali nano zastąpienie opisu kontynualnego analizą stanu mechanicznego bilionów molekuł.

Jednak ze względu na wyniki współczesnych obliczeń *ab initio* (łac. "z zasad pierwszych"), kiedy na podstawie znajomości jedynie liczby atomowej Z pierwiast-

ka oraz uniwersalnych stałych fizycznych można w wyniku opisu kwantowo-mechanicznego oraz za pomocą komputerów otrzymać dane o rodzaju tego pierwiastka, jego strukturze krystalicznej, gęstości, własnościach sprężystych, a nawet oszacować jego kolor (pierwsze prace tego typu dla pierwiastków o liczbach atomowych Z = 1 do Z = 49 zostały wykonane przez fizyków pracujących w IBM, Moruzziego, Janaka i Williamsa i zebrane w monografii wydanej w roku 1976 pt. *Calculated electronic structure of metals*) można uważać, że na podstawie opisu stanu mechanicznego elektronów i znajomości "zasad pierwszych", dzięki komputerom, poszukiwania stanu mechanicznego na poziomach innych niż poziom atomowy wydają się możliwe i celowe.

3. Opis klasyczny – wprowadzenie do dynamiki molekularnej Cosseratów

3.1. Układ jądro-chmura elektronowa w warunkach obciążenia mechanicznego

3.1.1. Obciążenie elektronu

Zbiór atomów k = 1, 2, 3, ... N zawartych w objętości dV (rys. 1) traktujemy jak układ kulek (punktów materialnych) o wektorach wodzących \mathbf{r}_k^o (położenie początkowe) w kartezjańskim układzie współrzędnych (x, y, z). Kulki te oddalone są od siebie o wartość $\mathbf{r}_{kl}^o = |\mathbf{r}_l^o - \mathbf{r}_k^o| = |\mathbf{r}_{kl}^o|$ (rys. 5).



Rys. 5. Model pary atomów k-l (układ wyjściowy)

Gdy do układu atomów k = 1, 2, 3, ... N przyłożymy mechaniczne obciążenie zewnętrzne, to stosując zasady mechaniki klasycznej, otrzymamy metodami dynamiki molekularnej [5], dla każdego atomu o numerze *k*, wartość i kierunek wypadkowego oddziaływania siłowego: $P_k = -\sum_{l \neq k}^N \nabla_k U^P(\mathbf{r}_{kl})$, gdzie U^P to potencjał dwuatomowy wynikający z odległości $\mathbf{r}_{kl} = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k| = |\mathbf{r}_{kl}|$ pomiędzy atomem o numerze *k* a kolejnymi atomami $l, l \neq k$ (rys. 5). ∇ to operator nabla. Kiedy dodatkowo uwzględnimy budowę elektronową atomu *k* o liczbie atomowej Z_k i elektronowi o numerze $\zeta_k = 1, 2, 3, ..., Z_k$ przyporządkujemy część siły P_k wg zależności: $P_k = \sum_{\zeta_k=1}^{Z_k} P_{\zeta_k}$, dalej przeprowadzimy redukcję oddziaływania P_{ζ_k}



Rys. 6. Model obciążonej pary atomów k-l



Rys. 7. Obciążenie elektronu e_{ζ_k} siłą $P_{\zeta_k} = \frac{P_k}{Z_k}$ działającą centralnie



Rys. 8. Redukcja siły P_{ζ_k} do chwilowego położenia elektronu e_{ζ_k}

z punktu centralnego w miejsce chwilowego położenia elektronu ζ_k (rys. 6–8), to elektron ten będzie obciążony dodatkowo momentem, którego wartość chwilową zapiszemy w postaci:

$$\boldsymbol{M}_{\zeta_k} = \boldsymbol{\rho}_{\zeta_k} \times \boldsymbol{P}_{\zeta_k} \tag{4}$$

gdzie:

 $\mathbf{\rho}_{\zeta_k}$ – promień wodzący momentu \boldsymbol{M}_{ζ_k} ,

 P_{ζ_k} – siła obciążająca elektron o numerze ζ_k .

Moduł wektora wodzącego $\mathbf{\rho}_{\zeta_k}$ wyznaczymy ze wzoru na promień orbity [2]: $\rho_{\zeta_k} = \rho_1 n_{\zeta_k}^2$, gdzie: $\rho_1 = \kappa_o h^2 / \pi e^2 Z_k m_e$ to promień orbity dla $n_{\zeta_k} = 1$, n_{ζ_k} to główna liczba kwantowa rozpatrywanego elektronu ζ_k . Wzór na promień orbity wynika z równoważności sił odśrodkowych i kulombowskich: $m_e \rho_{\zeta_k} \omega_{\zeta_k}^2 = \frac{Z_k e^2}{4\pi\kappa_o \rho_{\zeta_k}^2}$, gdzie: ω_{ζ_k} to prędkość kątowa elektronu, κ_o to przenikalność dielektryczna próżni, *e* jest ładunkiem elektronu, m_e jest masą elektronu, z zachowaniem reguły kwantowania momentu pędu elektronu (kwantowanie Bohra): $m_e \rho_{\zeta_k}^2 \omega_{\zeta_k} = n_{\zeta_k} \hbar$, gdzie: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, *h* to stała Plancka. Moduł wektora (4) przedstawimy w formie:

$$M_{\zeta_k} = \rho_1 \boldsymbol{n}_{\zeta_k}^2 P_{\zeta_k} \sin\left(\boldsymbol{\rho}_{\zeta_k}, \boldsymbol{P}_{\zeta_k}\right)$$
(5)

Działając na elektron będący w ruchu orbitalnym i spinowym, moment M_{ζ_k} powoduje precesję powłoki elektronu z prędkością kątową $\omega_{\zeta_k}^{\text{couple}}$ o kierunku prostopadłym do oddziaływania P_{ζ_k} (rys. 8).

Jeżeli ruch elektronu opiszemy momentem pędu jako sumę momentu orbitalnego i spinowego: $\mathbf{j}_{\zeta_k} = \mathbf{l}_{\zeta_k} + \mathbf{s}_{\zeta_k}$, to oddziaływanie momentowe przedstawimy w postaci:

$$\boldsymbol{M}_{\zeta_k} = \boldsymbol{\omega}_{\zeta_k}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{j}_{\zeta_k} \tag{6}$$

Kierunek wektora momentu pędu \mathbf{j}_{ζ_k} jest wielkością losową. Zapiszemy moduł z wyrażenia (6):

$$M_{\zeta_k} = \omega_{\zeta_k}^{\text{couple}} J_{\zeta_k} \sin(\omega_{\zeta_k}^{\text{couple}}, j_{\zeta_k})$$
(7)

Wartość $\sin(\omega_{\zeta_k}^{\text{couple}}, j_{\zeta_k})$ możemy wyznaczyć stosując zależności wynikające ze ścisłych obliczeń kwantowych [2] na moment pędu elektronu: $j_{\zeta_k} = \sqrt{j(j+1)}\hbar$,

gdzie *j* jest liczbą kwantową całkowitego momentu pędu elektronu przyjmującą wartości: j = l + s oraz j = l - s, gdzie: l = 0, 1, 2, ..., n - 1 to orbitalna liczba kwantowa, $s = \frac{1}{2}$ to spinowa liczba kwantowa. Znamy również ścisłe rozwiązanie na składową momentu pędu w wyróżnionym kierunku (w naszym przypadku będzie to kierunek wektora precesji $\omega_{\zeta_k}^{\text{couple}}$):

$$j_{\zeta_{k}}^{\text{couple}} = \operatorname{\mathsf{mech}}_{j} \hbar \tag{8}$$

gdzie mech_j = -j, -(j - 1), ..., 0, ..., (j - 1), j to mechaniczna liczba kwantowa wypadkowego momentu pędu elektronu, która przyjmuje 2j + 1 wartości różniących się o 1, zawartych w przedziale: $-j \le \text{mech}_j \le j$. Wyróżniony kierunek możemy opisać w postaci wzoru:

$$\varphi_{\zeta_k}^{\text{couple}} = \measuredangle(\boldsymbol{\omega}_{\zeta_k}^{\text{couple}}, \boldsymbol{j}_{\zeta_k}) = \measuredangle(\boldsymbol{\rho}_{\zeta_k}, \boldsymbol{P}_{\zeta_k}) = \arccos\frac{\text{mecn}_j}{\sqrt{j(j+1)}}$$
(9)

Na podstawie rys. 8 i wzoru (9) zapiszemy:

$$\sin(\boldsymbol{\omega}_{\zeta_{k}}^{\text{couple}}, \boldsymbol{j}_{\zeta_{k}}) = \sqrt{1 - \left(\frac{j_{\zeta_{k}}^{\text{couple}}}{j_{\zeta_{k}}}\right)^{2}} = \sqrt{1 - \frac{\text{mech}_{j}^{2}}{j(j+1)}}$$
(10)

i wzór (4) przedstawimy w postaci:

$$M_{\zeta_k} = \rho_1 P_{\zeta_k} n_{\zeta_k}^2 \sqrt{1 - \frac{\operatorname{mech}_j^2}{j(j+1)}}$$
(11)

Podobnie zapiszemy wzór (7):

$$M_{\zeta_k} = \omega_{\zeta_k}^{\text{couple}} \hbar \sqrt{j(j+1) - \text{mech}_j^2}$$
(12)

Należy wyróżnić precesję $\omega_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}}$, która nie wynika z oddziaływań o charakterze mechanicznym, a jest spowodowana działaniem momentu: $M_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}} = p_{\zeta_k}^S \times B_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}}$ pochodzącego od pola magnetycznego $B_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}}$ wywołanego ruchem orbitalnym elektronu o momencie pędu I_{ζ_k} , $(p_m^S)_{\zeta_k}$ to spinowy moment magnetyczny elektronu ζ_k . Indukcję $B_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}}$ liczy się z prawa Biota-Savarta z uwzględnieniem efektu relatywistycznej transformacji pola magnetycznego (czynnik Thomasa): $B_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}} = \frac{1}{2} \frac{Ze\mu_o}{4\pi\rho_{\zeta_k}^3} I_{\zeta_k}$, gdzie μ_o to przenikalność magnetyczna próżni. Precesję wektora spinowego momentu pędu elektronu ζ_k pochodzącą od oddziaływania spinorbita liczy się uwzględniając relatywistyczny efekt kinematyczny w układzie gdy przyspieszenie elektronu ma składową prostopadłą do wektora prędkości (precesja

Thomasa) ze wzoru: $\omega_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}} = -\frac{e}{2m_ec^2} (\mathbf{v}_{\zeta_k} \times \mathbf{F}_{\zeta_k})$, gdzie: \mathbf{v}_{ζ_k} to prędkość elektro-

nu, $F_{\zeta_k} = \frac{Z_k e^2}{4\pi\kappa_o \rho_{\zeta_k}^3} \rho_{\zeta_k}$ to siła kulombowska działająca na elektron ζ_k , *c* to prędkość

światła [12]. Wielkość $M_{\zeta_k}^{\text{spin-orbit}}$ można nazwać oddziaływaniem momentowym własnym i nie jest ona związana z żadnym działaniem zewnętrznym.

3.1.2. Obciążenie atomu

W przypadku całego atomu należy brać pod uwagę wypadkowe oddziaływanie momentowe pochodzące od wszystkich elektronów w atomie. Kiedy elektrony zapełniają powłokę atomu tak, że powłoka ma budowę symetryczną, tzn. jest całkowicie wypełniona elektronami w ilości $2n^2$, gdzie *n* to numer powłoki, główna liczba kwantowa, to wypadkowe oddziaływanie momentowe elektronów takiej powłoki redukuje się do zera. Liczba $2n^2$ wynika z zakazu Pauliego i wzajemnej relacji pomiędzy liczbami kwantowymi. Elektrony znajdujące się na powłokach o budowie niesymetrycznej, których liczba jest różna od $2n^2$ będą decydowały o oddziaływaniu momentowym całego atomu.

Wobec powyższego możemy powiedzieć, że w materiałach poddanych obciążeniom mechanicznym o wartości oddziaływania momentowego i dalej naprężenia momentowego decydują elektrony walencyjne.

Znając liczbę elektronów walencyjnych Z_k^{Cosserat} oraz ich chwilowe położenie, wypadkowe oddziaływanie momentowe atomu możemy opisać wzorem:

$$\boldsymbol{M}_{k} = \sum_{\zeta_{k}=1}^{Z_{k}^{\text{Cosserat}}} \boldsymbol{\rho}_{\zeta_{k}} \times \boldsymbol{P}_{\zeta_{k}}$$
(13)

Wzór (13) nie uwzględnia oddziaływania elektrostatycznego między elektronami. Moment M_k powoduje wypadkowy ruch precesyjny całej chmury elektronowej atomu k. Ruch ten opiszemy w postaci precesji wypadkowego wektora momentu pędu atomu J_k z prędkością kątową ω_k^{couple} (rys. 9).

Sumaryczne oddziaływanie momentowe całego atomu zapiszemy w postaci wzoru:

$$\boldsymbol{M}_{k} = \boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{k} \tag{14}$$

Wektory $\boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}}$ i \boldsymbol{P}_{k} są związane warunkiem prostopadłości:

$$\boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}} \boldsymbol{P}_{k} = 0 \tag{15}$$

Wypadkowy moment pędu J_k wyznaczymy wg zasad stosowanych w mechanice kwantowej [12] na podstawie znajomości wszystkich liczb kwantowych elektronów na niezapełnionych w pełni powłokach. Reguły wyznaczania całkowitego momentu pędu (reguły Hunda) są ustalone tak, aby w danej konfiguracji elektronowej atomu (tzn. dla danego rozmieszczenia elektronów na powłokach, podpowłokach i orbitalach) uzyskano minimum energii.



Rys. 9. Precesja ω_k^{couple} momentu pędu J_k atomu k wywołana obciążeniem momentowym chmury elektronowej

Sprowadza sie to do zasady dodawania spinowych momentów pedu tak, aby wartość liczby kwantowej wypadkowego spinowego momentu pędu była maksymalna, co przy zachowaniu zakazu Pauliego wywołuje także maksymalną wartość wypadkowego orbitalnego momentu pedu. Wyznaczając całkowity moment pedu atomów ciężkich, gdy występuje silne oddziaływanie pomiędzy momentem pędu orbitalnym i spinowym, dodajemy spinowe i orbitalne momenty pędu każdego elektronu oddzielnie (sprzężenie *ji*) i tak otrzymane momenty pędu tworzą po zsumowaniu moment całkowity. W atomach lekkich i średnich, gdzie występuje silne oddziaływanie pomiędzy spinami poszczególnych elektronów, oddzielnie dodajemy spinowe i orbitalne momenty pedu wszystkich elektronów (sprzeżenie LS) i następnie tworzymy sume tak otrzymanych całkowitych momentów spinowych i orbitalnych. Mając wyznaczone liczby kwantowe S_k całkowitego spinowego momentu pędu S_k i liczby kwantowe L_{k} całkowitego orbitalnego momentu pędu L_{k} , sumaryczny moment pędu atomu jest określony przez liczby kwantowe: $J_k = |L_k - S_k|$, gdy powłoka jest wypełniona mniej niż w połowie i $J_k = L_k + S_k$, gdy powłoka jest wypełniona więcej niż w połowie.

Znając ścisłe rozwiązania mechaniki kwantowej na moment pędu atomu k: $J_k = \left(\sqrt{J(J+1)}\right)_k \hbar$ oraz na składową momentu pędu w wyróżnionym kierunku: $J_k^{\text{couple}} = (\text{mech}_J)_k \hbar$, zapiszemy wzór na wyróżniony kierunek w przestrzeni wokół atomu w postaci:

$$\varphi_{k} = \measuredangle(\boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}}, \boldsymbol{J}_{k}) = \measuredangle(\boldsymbol{J}_{k}^{\text{couple}}, \boldsymbol{J}_{k}) = \arccos\frac{J_{k}^{\text{couple}}}{J_{k}} = \arccos\left(\frac{\text{mech}_{J}}{\sqrt{J(J+1)}}\right)_{k} \quad (16)$$

i przedstawimy wzór klasyczny (14) uzupełniony rozwiązaniami kwantowymi w postaci:

$$M_k = \omega_k^{\text{couple}} \hbar (\sqrt{J(J+1) - \text{mech}_J^2})_k$$
(17)

W przypadku braku ruchu orbitalnego (w wyniku np. działania pola krystalicznego) J = S = 1/2, mech_s = $\pm 1/2$ i otrzymamy:

$$M_k^S = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar(\omega_S^{\text{couple}})_k \tag{18}$$

Podsumowując, możemy powiedzieć, że w polu wywołanym mechaniczną zmianą odległości pomiędzy atomami powstaje dodatkowe oddziaływanie momentowe wynikające z niesymetrycznej budowy atomu, powodujące dodatkowy ruch elektronów w postaci precesji w kierunku prostopadłym do wypadkowego oddziaływania siłowego. Oddziaływanie mechaniczne zmienia kształt chmury elektronowej wypełniającej przestrzeń wokół jądra atomu.

3.1.3. Układ atomów

Uwzględniając niesymetryczną budowę elektronową, układ dwóch atomów k i l przedstawimy razem z ich momentami pędu J_k oraz J_r . Na rysunku 10 zaznaczono odległość pomiędzy atomami \mathbf{r}_{kl}^o w początkowym położeniu równowagi przy braku obciążenia zewnętrznego.

Kiedy przyłożymy obciążenie zewnętrzne, odległość pomiędzy atomami k i l ulegnie zmianie do wartości \mathbf{r}_{kl} i wystąpi precesja wektorów \mathbf{J}_k oraz \mathbf{J}_l (rys. 11).

Miarą obrotu układu atomów *k-l* mierzoną w punkcie *k* jest kąt precesji $\varphi_k^{\text{couple}}$ (rys. 12).

Zapiszemy również przyrost kąta precesji (rys.12) w kierunku \overline{kl} :

$$\varphi_{kl}^{\text{couple}} = \varphi_l^{\text{couple}} - \varphi_k^{\text{couple}}$$
(19)



Rys. 10. Wyjściowy (nieobciążony) układ dwóch atomów *k* i *l* w dynamice molekularnej Cosseratów



Rys. 11. Układ obciążonej pary atomów k-l z uwzględnieniem budowy elektronowej



Rys. 12. Obrót pary atomów *k-l* w punkcie *k* o kąt precesji $\varphi_k^{\text{couple}}$

Całkowity obrót układu atomów *k-l* rozpatrywany w punkcie *k* jako miara zaburzenia ruchu elektronów wywołanego obciążeniem mechanicznym jest przedstawiony na rys. 13 w postaci sumy kątów: $\varphi_k^{\text{couple}} + \varphi_{kl}^{\text{couple}}$.



Rys. 13. Całkowity obrót układu atomów k-l mierzony w punkcie k

Zdefiniujemy zmianę kąta precesji pomiędzy atomami k i l (analogia do odkształcenia skrętno-giętnego na poziomie makroskopowym):

$$\Theta_{kl} = \frac{\varphi_l^{\text{couple}} - \varphi_k^{\text{couple}}}{r_l - r_k} = \frac{\varphi_{kl}^{\text{couple}}}{r_{kl}}$$
(20)

Oddziaływanie momentowe M_k atomu zbioru k = 1, 2, 3, ..., N odniesiemy do powierzchni W_k zakreślonej przez promień van der Waalsa atomu k i zapiszemy wzór na wektor naprężenia momentowego w punkcie k oraz przyrost tego wektora w kierunku \overline{kl} względem punktu k:

$$\boldsymbol{\mu}_{k} = \frac{\boldsymbol{M}_{k}}{\boldsymbol{W}_{k}}, \qquad \boldsymbol{\mu}_{kl} = \frac{\boldsymbol{M}_{l} - \boldsymbol{M}_{k}}{\boldsymbol{W}_{k}}$$
(21)

Wektorom $\boldsymbol{\mu}_k$, $\boldsymbol{\mu}_{kl}$ odpowiadają kąty precesji $\boldsymbol{\varphi}_k$, $\boldsymbol{\varphi}_{kl}$.

Zapiszemy równanie ruchu atomu k spowodowane działaniem momentu M_k w postaci:

$$\frac{d\boldsymbol{J}_k}{dt} = \boldsymbol{\omega}_k^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_k = \boldsymbol{M}_k$$
(22)

Jeżeli oddziaływanie momentowe atomu odniesiemy do objętości molowej V_{N_A} , to możemy mówić o molowym naprężeniu momentowym atomów danego pierwiastka:

$$\boldsymbol{\mu}_{N_A} = \frac{N_A}{V_{N_A}} \boldsymbol{M}_k \tag{23}$$

gdzie:

 $N_4 = 6,0221367 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} - \text{liczba Avogadry.}$

Molowe naprężenie momentowe obliczane dla tej samej wartości obciążenia różnych atomów możemy traktować jako miarę zdolności danego pierwiastka do tworzenia naprężenia momentowego.

Dla układu czterech atomów (patrz rys. 14) zaburzenie ruchu elektronów w postaci precesji atomu *k* umieszczonego w początku układu współrzędnych zmierza do obrotu układu o kąt $\varphi_k^{\text{couple}}$ (rys. 15) oraz o kąt $\varphi_{kl}^{\text{couple}}$ (rys. 16).



Rys. 14. Wyjściowy układ atomów w dynamice molekularnej Cosseratów (wektory to momenty pędu)





Rys. 15. Obrót układu atomów o kąt precesji atomu k

Rys. 16. Obrót układu atomów w punkcie k mierzony względem kątów precesji atomów sąsiednich

Mechanizm powstawania naprężenia momentowego w układzie atomów k = 1,2,3,4 wyjaśnia rys. 17. Jeżeli rozetniemy więzy między atomami jak na rys. 17B i pozwolimy na swobodny obrót każdego atomu o kąty precesji $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$, odpowiednio (rys. 17C), to powtórne związanie atomów w punkcie leżącym w początku układu współrzędnych (rys. 17D) wywoła deformację całego układu i powstanie naprężeń.



Rys. 17. Mechanizm powstawania naprężenia momentowego w układzie atomów k = 1, 2, 3, 4

3.1.4. Równania Hamiltona dla układu atomów

Dla każdego atomu *k* wprowadzimy potencjał obrotowy Cosseratów $U^{M}(\varphi_{k}^{\text{couple}})$, współrzędną uogólnioną w postaci obrotu $\varphi_{k}^{\text{couple}}$ i uogólniony moment pędu J_{k} . Zapiszemy hamiltonian dla układu takich atomów k = 1, 2, 3, ..., N:

$$H\left(\boldsymbol{\varphi}_{k}^{\text{couple}}, \boldsymbol{J}_{k}\right) = \sum_{k=1}^{N} \frac{\boldsymbol{J}_{k}^{2}}{2I_{k}} + \sum_{k=1}^{N} U^{M}\left(\boldsymbol{\varphi}_{k}^{\text{couple}}\right)$$
(24)

gdzie:

$$I_k = \sum_{\zeta_k=1}^{Z^{\text{Cossent}}} m_e \rho_{\zeta_k}^2 - \text{moment bezwładności układu elektronów walencyjnych.}$$

Zgodnie z zasadą Hamiltona współrzędne uogólnione i uogólnione momenty pędu spełniają równania Hamiltona:

$$\dot{\boldsymbol{\phi}}_{k}^{\text{couple}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{J}_{k}}$$

$$\dot{\boldsymbol{J}}_{k} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\phi}_{k}^{\text{couple}}}$$
(25)

co łącznie z zapisanym powyżej hamiltonianem daje:

$$\dot{\boldsymbol{\phi}}_{k}^{\text{couple}} = \frac{\boldsymbol{J}_{k}}{\boldsymbol{I}_{k}}$$

$$\dot{\boldsymbol{J}}_{k} = \boldsymbol{M}_{k}$$
(26)

Wobec powyższego moment działający na każdy atom k możemy zapisać w postaci wyrażenia:

29

$$\boldsymbol{M}_{k} = \frac{\partial U^{M}}{\partial \boldsymbol{\varphi}_{k}^{\text{couple}}}$$
(27)

Posługując się potencjałem $U^M(\varphi_k^{\text{couple}})$, zapiszemy równanie ruchu:

$$I_k \ddot{\boldsymbol{\varphi}}_k^{\text{couple}} = \frac{\partial U^M}{\partial \boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}}}$$
(28)

oraz stan naprężenia momentowego w punkcie k:

$$\boldsymbol{\mu}_{k} = \frac{1}{W_{k}} \frac{\partial U^{M}}{\partial \boldsymbol{\varphi}_{k}^{\text{couple}}}$$
(29)

3.1.5. Energia potencjalna oddziaływań momentowych

Zapiszemy wartość bezwzględną wyrażenia (14):

$$M_k = \omega_k^{\text{couple}} J_k \sin \varphi_k^{\text{couple}}$$
(30)

Zmiana kąta φ_k o wartość $d\varphi_k$ wiąże się z wykonaniem pracy:

$$dA_k = \boldsymbol{M}_k d\boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}} = \boldsymbol{\omega}_k^{\text{couple}} J_k \sin \boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}} d\boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}}$$
(31)

która powoduje dodatkowy wzrost energii potencjalnej atomu o wartość:

$$dU_k^M = \omega_k^{\text{couple}} J_k \sin \varphi_k^{\text{couple}} d\varphi_k^{\text{couple}}$$
(32)

Całkując obustronnie ostatnie wyrażenie, otrzymujemy:

$$\int_{(\phi)} dU_k^M = \int_{(\phi)} \omega_k^{\text{couple}} J_k \sin \varphi_k^{\text{couple}} d\varphi_k^{\text{couple}} = -\omega_k^{\text{couple}} J_k \cos \varphi_k^{\text{couple}} + \text{const}$$
(33)

Dla const = 0 otrzymujemy:

$$U_k^M = -\boldsymbol{\omega}_k^{\text{couple}} \boldsymbol{J}_k \tag{34}$$

Zapisując energię całkowitą atomu będącego w polu oddziaływań mechanicznych, należy wziąć pod uwagę nie tylko energię $U_k^P(r_{kl})$, wywołaną oddziaływaniami siłowymi P_k i związaną ze zmianą odległości pomiędzy atomami r_{kl} , ale również energię $U_k^M(\varphi_k^{\text{couple}})$ związaną z kątem precesji $\varphi_k^{\text{couple}}$ atomu pod wpływem oddziaływań momentowych M_k . Oznacza to, że na energię całkowitą atomu wpływa nie tylko wartość, ale również kierunek oddziaływania P_k .

Energie:

$$U_k^P(\mathbf{r}_{kl}), \quad U_k^M(\mathbf{\phi}_k^{\text{couple}})$$
 (35)

są ze sobą sprzężone poprzez atomowe stopnie swobody. W opisie kwantowym energie $U_k^P(\mathbf{r}_{kl})$, $U_k^M(\boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}})$ mogą być rozpatrywane niezależnie ze względu na dużą różnicę pomiędzy masą elektronu i jądra (przybliżenie adiabatyczne lub przybliżenie Borna-Oppenheimera) [5].

Sprzężenie pomiędzy potencjałami $U_k^P(\mathbf{r}_{kl}), \quad U_k^M(\boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}})$ zapiszemy w postaci:

$$\frac{\partial U_k^M}{\partial \boldsymbol{\varphi}_k^{\text{couple}}} = \sum_{\zeta_k=1}^{Z_k^{\text{Cosserat}}} \left[\boldsymbol{\rho}_{\zeta_k} \times \frac{1}{Z_k} \sum_{l \neq k}^N \boldsymbol{\nabla}_k U_k^P \right]$$
(36)

3.1.6. Uzupełnienie operatora Hamiltona

Operator Hamiltona \hat{H} izolowanego nierelatywistycznego układu atomów [5], w skład którego wchodzi operator energii kinetycznej elektronów: $\hat{T}^e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2$, operator energii kinetycznej jąder: $\hat{T}^Z = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2$, operator energii potencjalnej oddziaływań elektrostatycznych elektron–elektron: $\hat{U}^{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$, operator energii potencjalnej oddziaływań elektrostatycznych elektron–jądro: $\hat{U}^{eZ} = \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{|r_i - R_k|}$, operator energii potencjalnej oddziaływań elektrostatycznych jądro–jądro: $\hat{U}^{ZZ} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{Z_i Z_k e^2}{|R_i - R_k|}$, zapiszemy w nowej formie uzupełniając go ope-

ratorem energii oddziaływań momentowych \hat{U}^{M} :

$$\hat{H} = \hat{T}^{e} + \hat{T}^{Z} + \hat{U}^{ee} + \hat{U}^{eZ} + \hat{U}^{ZZ} + \hat{U}^{M}$$
(37)

Operator oddziaływań momentowych zapiszemy dla elektronu o numerze ζ_k na podstawie wzoru: $U_{\zeta_k}^M = -\omega_{\zeta_k}^{\text{couple}} J_{\zeta_k}$, podstawiając w miejsce momentu pędu

$$\boldsymbol{J}_{\zeta_{k}} \text{ operator: } \hat{\boldsymbol{J}}_{\zeta_{k}} = \boldsymbol{\rho}_{\zeta_{k}} \times \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \boldsymbol{\nabla} \text{ i otrzymamy:}$$
$$\hat{\boldsymbol{U}}_{\zeta_{k}}^{M} = -\boldsymbol{\omega}_{\zeta_{k}}^{\text{couple}} \left(\boldsymbol{\rho}_{\zeta_{k}} \times \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \boldsymbol{\nabla} \right)$$
(38)

Ewentualnie na podstawie wzoru: $U_{\zeta_k}^M = -\mathbf{p}_{\zeta_k} \mathbf{P}_{\zeta_k}$, podstawiając w miejsce oddziaływania siłowego \mathbf{P}_{ζ_k} operator: $\hat{\mathbf{P}}_{\zeta_k} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \mathbf{V} \right)$, otrzymamy:

$$\hat{U}_{\zeta_k}^M = -\mathbf{\rho}_{\zeta_k} \frac{d}{dt} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \mathbf{\nabla} \right)$$
(39)

Biorąc pod uwagę wszystkie elektrony tworzące oddziaływanie momentowe atomu, formuły (38) i (39) należy zaopatrzyć w sumę od $\zeta_k = 1$ do $\zeta_k = Z_k^{\text{Cosserat}}$.

3.1.7. Uzupełnienie energii elektronowej molekuły wieloatomowej

Kiedy rozpatrujemy energię elektronową molekuły wieloatomowej złożonej z atomów A, B,..., Y, obciążonej mechanicznie, zapiszemy sumę energii potencjalnej U_w dla ruchu jąder atomów składowych U^{jader} oraz energii wynikającej z precesji powłok elektronowych tych atomów U^{couple} :

$$U_{w} = U^{jader} + U^{couple} \tag{40}$$

Na podstawie znajomości długości wiązań chemicznych oraz kątów pomiędzy atomami tworzącymi molekułę, energię U^{jqder} w przybliżeniu harmonicznym zapiszemy w postaci sumy [48]:

- 1) energii wiązań: $\sum_{A-B} \frac{1}{2} c_{AB} (r_{A-B} r_{A-B}^{o})^2$, gdzie: r_{A-B}^{o} to odległość wiązań A–B między atomami A, B, w stanie nieobciążonym mechanicznie (dla minimalnej energii potencjalnej), r_{A-B} to odległość takich wiązań rozciąganych lub ściskanych, c_{AB} to stała siłowa;
- 2) energii wynikającej ze zmiany kąta wiązania A–B–C: $\sum_{A-B-C} \frac{1}{2} c_{ABC} (\alpha_{A-B-C} - \alpha_{A-B-C}^{o})^{2}, \text{ gdzie: kąty } \alpha_{A-B-C}, \alpha_{A-B-C}^{o} \text{ oraz stała } c_{ABC}$ pełnią podobną rolę jak poprzednio, przy czym zmiana kąta (A–B–C) odbywa

się przy nie zmienionej długości wiązań A–B i B–C;

3) energii pomiędzy atomami X, Y, które nie tworzą wiązań X–Y ani nie stanowią ogniwa w łańcuchu wiązań typu X–A–Y. Takie oddziaływanie międzymolekularne możemy opisać potencjałem Lennarda-Jonesa: $V_{IJ}(X, Y) =$

$$= \varepsilon \left[\left(\frac{r_e}{r_{XY}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_e}{r_{XY}} \right)^6 \right]$$
gdzie ε , r_e to stałe potencjału *LJ*;

- 4) energii oddziaływań elektrostatycznych zależnej od ładunków q_X , q_Y , jakie posiadają atomy niezwiązane X,Y: $\sum_{X,Y} \frac{q_X,q_Y}{r_{XY}}$;
- 5) energii wynikającej z kątów torsyjnych: $\sum_{inw} W_{A-B-C-D} (1 \cos n \omega_{B-C})$, która pochodzi od rotacji o kąt ω_{B-C} wokół wiązania B–C, w łańcuchu wiązań A–B–C–D, *n* jest krotnością przy pełnym obrocie.

Wobec powyższego zapiszemy:

$$U^{\text{jqder}} = \sum_{A-B} \frac{1}{2} c_{AB} (r_{A-B} - r_{A-B}^{o})^{2} + \sum_{A-B-C} \frac{1}{2} c_{ABC} (\alpha_{A-B-C} - \alpha_{A-B-C}^{o})^{2} + \sum_{X,\dots,Y} V_{LJ} (X,Y) + \sum_{X,\dots,Y} \frac{q_{X}q_{Y}}{r_{XY}} + \sum_{\text{inw}} W_{A-B-C-D} (1 - \cos n \omega_{B-C})$$
(41)

$$U^{\text{couple}} = -\sum_{A,B,\dots,Y} \omega_A^{\text{couple}} J_A \cos \varphi_A^{\text{couple}}$$
(42)

gdzie:

3.1.8. Okresowe własności oddziaływania momentowego

Oddziaływanie momentowe atomu jest związane z promieniem powłoki zewnętrznej ρ_k decydującej o wielkości atomu. Ponieważ promienie atomów wykazują okresowość ze względu na położenie w układzie okresowym, możemy mówić o okresowych własnościach oddziaływania momentowego.

Ze względu na siły elektrostatycznego odpychania pomiędzy elektronami mówimy o tzw. ładunku efektywnym jądra eZ_{ef} i przekształcając wzór na promień atomu, otrzymujemy:

$$\rho_k = \frac{\rho_1}{Z_{\rm ef}} \boldsymbol{n}_k^2 \tag{43}$$

Położenie pierwiastka w układzie okresowym opisuje stopień zapełnienia powłoki zewnętrznej (walencyjnej) elektronami. W miarę zapełniania powłoki walencyjnej obserwujemy wzrost wartości Z_{ef} , co powoduje spadek wartości ρ_k i spadek oddziaływania momentowego M_k . Obserwujemy jednocześnie wzrost energii jonizacji atomu. Dalszy wzrost ilości elektronów walencyjnych dla pierwiastków pod koniec okresu skutkuje powstaniem zjawiska odpychania pomiędzy elektronami (zjawisko ekranowania), co powoduje wzrost ρ_{k} i M_{k} .

Jeżeli powłoka zewnętrzna jest wypełniona całkowicie, to wartość oddziaływania M_k skokowo spada do zera. Natomiast energia jonizacji dla atomu o całkowicie wypełnionych powłokach zewnętrznych ma największą wartość. W związku z przedstawioną prawidłowością możemy stwierdzić, że największe oddziaływanie momentowe M_k w danym okresie mają atomy pierwszej grupy układu okresowego, a oddziaływanie to jest najmniejsze dla atomów ze środka okresu.

Natomiast niezależnie od układu okresowego pierwiastków znane są tzw. atomy rydbergowskie, które w wyniku wzbudzenia co najmniej jednego elektronu do bardzo wysokich potencjałów, kiedy główna liczba kwantowa może wynosić nawet n = 350, osiągają rozmiary rzędu 10^{-5} m. W związku z tym przewiduje się, że oddziaływania momentowe w tych atomach będą pięć rzędów wielkości większe niż dla zwykłego atomu. W atomach takich poddanych działaniu zewnętrznego pola elektrycznego stwierdzono oscylacje elektronu, co można tłumaczyć zaburzeniem ruchu elektronu w polu elektrycznym. Można przypuszczać, że podobnie atomy te będą się zachowywać w polu mechanicznym. Dla atomów rydbergowskich opis kwantowy i klasyczny wykazuje idealną zbieżność. Atomy rydbergowskie występują w postaci plazmy w przestrzeni kosmicznej i w materii [24].

3.2. Atomy ze środkiem masy obciążone mechanicznie

Atom z nieobsadzonymi w pełni powłokami nie posiada środka symetrii, co oznacza, że środek masy układu elektronów $Z_k^{s.m.}$ oraz nukleonów $A_k^{s.m.}$ (protony i neutrony związane siłami jądrowymi) jest przesunięty względem środka wynikającego z działania sił kulombowskich. Analogią mechaniczną jest konstrukcja wahadła żyroskopowego, gdzie środek ciężkości żyroskopu jest przesunięty względem środka zawieszenia.

W celu wyznaczenia środka masy nukleonów $A_k^{s.m.}$ posłużymy się modelem powłokowym jądra [2].

Z punktu widzenia klasycznej mechaniki wyróżnimy trzy charakterystyczne punkty atomu: środek masy elektronów $Z_k^{s.m.}$, środek masy nukleonów $A_k^{s.m.}$ i środek masy $s.m._k$ całego atomu k. Odległość pomiędzy $Z_k^{s.m.}$ i $A_k^{s.m.}$ oznaczymy jako $\rho_k^{s.m.}$. Odległość ta wynika z równowagi pomiędzy siłą odśrodkową działającą na elektrony i nukleony a elektrostatyczną siłą kulombowską działającą pomiędzy elektronami i protonami. Siłowe oddziaływanie międzyatomowe w postaci wektora siły będzie przyłożone teraz do środka masy *s.m.*_k atomu *k*. Dalej możemy opisać oddziaływanie momentowe elektronowe na ramieniu $\rho_k^{Z_{s.m.}}$ równym odległości pomiędzy *s.m.*_k a $Z_k^{s.m.}$ oraz oddziaływanie momentowe jądrowe na ramieniu $\rho_k^{A_{s.m.}}$ liczonym jako odległość pomiędzy *s.m.*_k i $A_k^{s.m.}$.

Na równowagę pomiędzy układem elektronów i nukleonów (promień $\rho_k^{s.m.}$) będą wpływać również siły elektrostatyczne układu elektron-elektron. Jak już wspomniano (podrozdział 3.1.8.), siły te powoduja, że pole elektrostatyczne rozkłada się nieco odmiennie od opisu kulombowskiego, dla atomów ciężkich potencjał pola proporcjonalny jest do $(Z-1)^2$, gdzie Z to liczba elektronów. Wpływ oddziaływania układu elektron-elektron wzrasta w miarę oddalania się od jądra i możemy mówić o efektywnym ładunku pola eZ_{ef} , $Z_{ef} < Z$. Na orbitach zewnętrznych wpływ sił elektrostatycznych układu elektron-elektron jest już na tyle duży, że opis pola elektron--jądro nie zależy od liczby Z. W przybliżeniu pole to można opisać poprzez energię wiązania elektronu w atomie wodoru. Na wielkość promienia $\rho_k^{s.m.}$ będą wpływały również siły jądrowe jako wynik działania sił elektrostatycznych układu proton-proton i oddziaływań silnych pomiedzy nukleonami. Można również stwierdzić niesymetryczna budowe jądra w postaci przesunięcia środka masy nukleonów względem środka wyznaczonego przez działanie sił jadrowych. Zasieg sił jadrowych mierzy się w femtometrach (10^{-15} m), położenie elektronów w angstremach (10^{-10} m), dlatego też na poziomie elektronowym siły jądrowe tylko nieznacznie wpływają na $\rho_{k}^{s.m.}$.

3.2.1. Atom z jednym elektronem i jednym protonem

Model atomu ze środkiem masy [2] występuje w fizyce dla atomu z jednym elektronem i jądrem w postaci jednego protonu. Posługiwanie się takim modelem wyjaśnia występowanie deuteru odkrytego przez H.C. Ureya w roku 1934. Zarówno elektron, jak i jądro krążą wokół ich wspólnego środka masy *s.m.* (rys. 18).

W takim modelu oddziaływanie międzyatomowe P będzie przyłożone do środka masy (rys. 18). Rozdzielimy oddziaływanie międzyatomowe P wg wzoru $P = P_e + P_p$. Dokonamy redukcji oddziaływania P_e w miejsce chwilowego położenia elektronu (rys.19) a oddziaływania P_p w miejsce chwilowego położenia protonu (rys. 20) i zapiszemy oddziaływanie momentowe elektronowe:

$$\boldsymbol{M}_{e} = \frac{\boldsymbol{m}_{p}}{\boldsymbol{m}_{p} + \boldsymbol{m}_{e}} \,\boldsymbol{\rho}^{s.m.} \times \boldsymbol{P}_{e} \tag{44}$$

i jądrowe:

$$\boldsymbol{M}_{p} = \frac{\boldsymbol{m}_{e}}{\boldsymbol{m}_{p} + \boldsymbol{m}_{e}} \,\boldsymbol{\rho}^{s.m.} \times \boldsymbol{P}_{p} \tag{45}$$



Rys. 18. Obciążenie atomu ze środkiem masy (jeden elektron i jeden proton)



Rys. 19. Redukcja obciążenia atomu ze środkiem masy w miejsce chwilowego położenia elektronu



Rys. 20. Redukcja obciążenia atomu ze środkiem masy w miejsce chwilowego położenia jądra (protonu)

$$\frac{m_p}{m_p + m_e} \,\mathbf{\rho}^{s.m.} = \mathbf{\rho}_e \tag{46}$$

$$\frac{m_e}{m_p + m_e} \,\mathbf{\rho}^{\text{s.m.}} = \mathbf{\rho}_p \tag{47}$$

- ρ_e, ρ_p odległości elektronu i protonu od środka masy, odpowiednio,
- m_p masa protonu,
- m_{e} masa elektronu.

Ponieważ masa protonu m_p jest o trzy rzędy wielkości większa od masy elektronu m_e , oddziaływanie momentowe jądrowe będzie o trzy rzędy wielkości mniejsze od oddziaływania momentowego elektronowego. Pierwsze z tych oddziaływań będzie mogło być badane doświadczalnie w spektrometrze Nuclear Magnetic Resonance natomiast drugie w spektrometrze Electron Paramagnetic Resonance.

Promień $\mathbf{\rho}_{s.m.}$ wyznaczymy zapisując równowagę sił odśrodkowych działających na elektron $m_e \omega_{s.m.}^2 \mathbf{\rho}_e$ lub proton $m_p \omega_{s.m.}^2 \mathbf{\rho}_p$ oraz elektrostatycznych sił kulombow-skich układu elektron–proton: $\frac{e^2}{4\pi\kappa_o \rho_{s.m.}^2}$ (zjawisko ekranowania elektronowego pominięto). Przykładowo dla protonu zapiszemy:

$$m_p \omega_{s.m.}^2 \rho_p = \frac{e^2}{4\pi\kappa_o \rho_{s.m.}^2}$$
(48)

Podstawiając (47) do (48), otrzymamy:

$$m_{\rm zr}\omega_{s.m.}^2\rho_{s.m.}^3 = \frac{e^2}{4\pi\kappa_o}$$
(49)

gdzie:

$$m_{\rm zr} = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$
 – masa zredukowana układu elektron–proton

Zastosujemy teraz do (49) prawo kwantowania Bohra:

$$m_{\rm zr}\omega_{s.m.}\rho_{s.m.}^2 = n\hbar \tag{50}$$

gdzie:

n=1,2,3,... – całkowita liczba kwantowa dla atomu ze środkiem masy i zapiszemy:
$$\frac{n^2\hbar^2}{m_x\rho_{s,m_s}} = \frac{e^2}{4\pi\kappa_o}$$
(51)

otrzymując wzór na poszukiwaną odległość pomiędzy elektronem i protonem w postaci skwantowanej:

$$\rho_{s.m.} = \frac{4\pi\kappa_o \hbar^2}{m_{zr} e^2} n^2$$
(52)

Odległości $\mathbf{\rho}_{e}$ oraz $\mathbf{\rho}_{p}$ obliczamy z układu równań, gdzie pierwszym równaniem będzie wzór:

$$\boldsymbol{\rho}_{s.m.} = \boldsymbol{\rho}_e + \boldsymbol{\rho}_p \tag{53}$$

Drugim równaniem jest definicja środka masy układu elektron–proton umieszczonego w początku układu współrzędnych:

$$m_p \rho_p = m_e \rho_e \tag{54}$$

Oddziaływanie M_e i M_p spowoduje zaburzenie atomu w postaci precesji opisywanej prędkościami kątowymi ω_e^{couple} , ω_p^{couple} w kierunku prostopadłym do oddziaływania P. Kierunek wektorów precesji ω_e^{couple} , ω_p^{couple} będzie przechodził przez środek masy *s.m.* Wprowadzając całkowity moment pędu elektronu $J_e = L_e + S_e$ oraz jądra $J_p = L_p + S_p$, oddziaływania momentowe elektronowe i protonowe zapiszemy w postaci:

$$\boldsymbol{M}_{e} = \boldsymbol{\omega}_{e}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{e} \tag{55}$$

$$\boldsymbol{M}_{p} = \boldsymbol{\omega}_{p}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{p}$$
(56)

Całkowite oddziaływanie momentowe takiego atomu będzie sumą:

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}_{e} + \boldsymbol{M}_{p} = \boldsymbol{\omega}_{s.m.}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{s.m.}$$
(57)

gdzie:

$$\boldsymbol{J}_{s.m.} = \boldsymbol{J}_e + \boldsymbol{J}_p, \ \boldsymbol{\omega}_{s.m.}^{\text{couple}} = \boldsymbol{\omega}_e^{\text{couple}} + \boldsymbol{\omega}_p^{\text{couple}}.$$

3.2.2. Atom ze środkiem mas elektronów i nukleonów

Rozszerzymy powyższy model na atom zbudowany z Z_k elektronów i włączymy do opisu model powłokowy jądra, w którym nukleony w ilości A_k , czyli protony w ilości równej liczbie atomowej Z_k i neutrony w ilości równej liczbie neutronowej $N_k (A_k = Z_k + N_k)$ posiadają orbitalny i spinowy moment pędu i skupione są na powłokach podobnie jak elektrony.



Rys. 21. Model obciążenia momentowego atomu *k* ze środkiem masy ustalonym przez środek mas elektronów i nukleonów

Gdy nukleony tworzą powłoki zamknięte (liczba protonów lub neutronów na powłokach jest utworzona przez tzw. liczby magiczne 2, 8, 20, 50, 82, ...) oddziaływanie momentowe takiego jądra równe jest zero (środek masy nukleonów $A_k^{s.m.}$ będzie pokrywał się ze środkiem masy atomu $s.m._k$). Gdy powłoki jądrowe nie będą w pełni zapełnione (liczba nukleonów będzie różna od liczb magicznych), możemy mówić o niesymetrycznej budowie jądra i wyróżniając ramię oddziaływania w postaci odległości pomiędzy środkiem masy nukleonów $A_k^{s.m.}$ a środkiem masy $s.m._k$, będziemy opisywać oddziaływanie momentowe jądrowe $M_k^{A_{s.m.}}$ (rys. 21).

Podobnie oddziaływanie momentowe elektronowe $M_k^{Z_{s.m.}}$ opiszemy na ramieniu równym odległości pomiędzy środkiem masy układu elektronów $Z_k^{s.m.}$ a środkiem masy atomu s.m._k. Na rysunku 21 umieszczono siłę międzyatomową P_k działającą w środku masy atomu oraz rezultat redukcji w postaci obciążenia momentowego $M_k^{Z_{s.m.}}$ i $M_k^{A_{s.m.}}$ łącznie.

Elektrony i nukleony będą skupione odpowiednio na promieniach $\mathbf{R}_{k}^{Z_{s,m.}}$ i $\mathbf{R}_{k}^{A_{s,m.}}$ Promienie te obliczymy względem dowolnie przyjętego początku układu współrzędnych w sposób klasyczny wg zasad stosowanych w geometrii mas, na podstawie wzorów:

$$\boldsymbol{R}_{k}^{Z_{s.m.}} = \frac{\sum_{1}^{Z_{k}} (m_{e})_{\zeta_{k}} \boldsymbol{r}_{\zeta_{k}}}{\sum_{1}^{Z_{k}} (m_{e})_{\zeta_{k}}}$$
(58)

$$\boldsymbol{R}_{k}^{A_{s.m.}} = \frac{\sum_{1}^{A_{k}} (m_{a})_{\varsigma_{k}} \boldsymbol{r}_{\varsigma_{k}}}{\sum_{1}^{A_{k}} (m_{a})_{\varsigma_{k}}}$$
(59)

gdzie:

- $(m_a)_{\varsigma_k}$ masa nukleonu o numerze $\varsigma_k = 1, 2, 3, \dots A_k$ (masa protonu i neutronu niewiele się od siebie różnią),
- \mathbf{r}_{ζ_k} , \mathbf{r}_{ς_k} wektory położenia elektronu o numerze ζ_k i nukleonu ς_k od początku układu współrzędnych, odpowiednio.

Zapiszemy odległość pomiędzy promieniami $\mathbf{R}_{k}^{Z_{s.m.}}$ i $\mathbf{R}_{k}^{A_{s.m.}}$ wynikającą z równowagi sił odśrodkowych i kulombowskich (pominięto ekranowanie elektronowe oraz działanie sił jądrowych):

$$\boldsymbol{R}_{k}^{Z_{s.m.}} - \boldsymbol{R}_{k}^{A_{s.m.}} = \boldsymbol{\rho}_{k}^{s.m.}$$

$$\tag{60}$$

Oznaczymy odległość skupionych mas elektronów $\rho_k^{Z_{s.m.}}$ i nukleonów $\rho_k^{A_{s.m.}}$ od środka masy *s.m.*_k i zapiszemy:

$$\boldsymbol{\rho}_k^{Z_{s.m.}} + \boldsymbol{\rho}_k^{A_{s.m.}} = \boldsymbol{\rho}_k^{s.m.} \tag{61}$$

Jeżeli początek układu współrzędnych umieścimy w środku masy $s.m._k$, to będzie spełniona zależność:

$$m_k^{A_{s.m.}} \rho_k^{A_{s.m.}} = m_k^{Z_{s.m.}} \rho_k^{Z_{s.m.}}$$
(62)

gdzie:

$$m_k^{A_{k.m.}} = A_k m_a - \Delta m$$
 – masa skupiona nukleonów atomu *k* pomniejszona o defekt masy Δm wynikający z energii wiązania nukleonów,

$$m_k^{Z_{s.m.}} = Z_k m_e$$
 – masa skupiona elektronów atomu k.

Utratę masy spowodowaną wiązaniem elektronów jako bardzo małą pominiemy. Łącząc (61) i (62), otrzymujemy:

$$\rho_k^{Z_{s.m.}} = \left(\frac{A_k m_a - \Delta m}{A_k m_a - \Delta m + Z_k m_e}\right) \rho_k^{s.m.}$$
(63)

$$\rho_k^{A_{s.m.}} = \left(\frac{Z_k m_e}{A_k m_a - \Delta m + Z_k m_e}\right) \rho_k^{s.m.}$$
(64)

Promień $\rho_k^{s.m.}$ wyznaczymy zapisując całkowity moment pędu atomu względem środka masy w postaci:

$$J_{k}^{Z_{s.m.}} = m_{k}^{A_{s.m.}} \omega_{k}^{s.m.} (\rho_{k}^{A_{s.m.}})^{2} + m_{k}^{Z_{s.m.}} \omega_{k}^{s.m.} (\rho_{k}^{Z_{s.m.}})^{2}$$
(65)

Zastosujemy do zależności (65) regułę kwantowania Bohra:

$$m_{k}^{A_{s.m.}}\omega_{k}^{s.m.}(\rho_{k}^{A_{s.m.}})^{2} + m_{k}^{Z_{s.m.}}\omega_{k}^{s.m.}(\rho_{k}^{Z_{s.m.}})^{2} = n_{k}\hbar$$
(66)

gdzie $n_k = 1, 2, 3, ...,$ a następnie podstawiając do (66) zależności (63) oraz (64), otrzymamy:

$$(m_{\rm zr}^{s.m.})_k \omega_k^{s.m.} (\rho_k^{s.m.})^2 = n_k \hbar$$
(67)

gdzie:

$$(m_{zx}^{s.m.})_k = \frac{(A_k m_a - \Delta m) Z_k m_e}{A_k m_a - \Delta m + Z_k m_e}$$
(68)

to masa zredukowana. Zapiszemy teraz równowagę pomiędzy siłą odśrodkową działającą na elektrony lub nukleony skupione w środku mas na promieniu $\rho_k^{Z_{s.m.}}$, $\rho_k^{A_{s.m.}}$ odpowiednio a elektrostatyczną siłą kulombowską pomiędzy elektronami a protonami w ilości Z_k . Przykładowo biorąc pod uwagę elektrony, zapiszemy:

$$m_{k}^{Z_{s.m.}}(\omega_{k}^{s.m.})^{2}\rho_{k}^{Z_{s.m.}} = \frac{Z_{k}e^{2}}{4\pi\kappa_{o}(\rho_{k}^{s.m.})^{2}}$$
(69)

Łącząc (63), (67), (68) i podstawiając do (69), otrzymujemy formułę:

$$\frac{n_k^2 \hbar^2}{(m_{\rm zr}^{s.m.})_k (\rho_k^{s.m.})} = \frac{e^2}{4\pi\kappa_o}$$
(70)

z której wyznaczymy poszukiwaną odległość pomiędzy środkiem masy układu elektronów i nukleonów:

$$\rho_k^{s.m.} = \frac{4\pi\kappa_o \hbar^2}{(m_{zr}^{s.m.})_k e^2} n_k^2$$
(71)

Oddziaływanie międzyatomowe P_k będzie przyłożone do środka masy $s.m_k$. Część siły P_k będzie związana z obciążeniem elektronów w punkcie $Z_k^{s.m.}$ a część działa na nukleony w punkcie $A_k^{s.m.}$, $P_k = P_k^{A_{s.m.}} + P_k^{Z_{s.m.}}$. Dokonamy redukcji oddziaływania $P_k^{Z_{s.m.}}$ i $P_k^{A_{s.m.}}$ w miejsce skupionych elektronów i nukleonów odpowiednio i zapiszemy oddziaływanie momentowe pochodzące od elektronów w postaci:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{\boldsymbol{Z}_{s.m.}} = \boldsymbol{\rho}_{k}^{\boldsymbol{Z}_{s.m.}} \times \boldsymbol{P}_{k}$$
(72)

oraz oddziaływanie momentowe pochodzące od nukleonów:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{A_{s.m.}} = \boldsymbol{\rho}_{k}^{A_{s.m.}} \times \boldsymbol{P}_{k}^{A_{s.m.}}$$
(73)

Całkowite oddziaływanie momentowe atomu ze środkiem masy będzie sumą:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{s.m.} = \boldsymbol{M}_{k}^{A_{s.m.}} + \boldsymbol{M}_{k}^{Z_{s.m.}}$$
(74)

Jeżeli znamy całkowity (orbitalny plus spinowy) moment pędu $J_k^{Z_{s.m.}}$ elektronów skupionych w środku masy $Z_k^{s.m.}$ względem środka masy $s.m._k$ oraz znamy zaburzenie tego ruchu w postaci prędkości kątowej precesji $\omega_{Z_k}^{\text{couple}}$, to możemy wyznaczyć oddziaływanie momentowe spowodowane przez elektrony walencyjne w postaci:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{Z_{s.m.}} = \boldsymbol{\omega}_{Z_{k}}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{k}^{Z_{s.m.}}$$
(75)

Podobnie zapiszemy dla nukleonów na niezapełnionych powokach:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{A_{s.m.}} = \boldsymbol{\omega}_{A_{k}}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{k}^{A_{s.m.}}$$
(76)

W podrozdziale tym założyliśmy że środek masy układu elektronów $Z_k^{s.m.}$ podlega takim samym prawom kwantyzacji jak pojedynczy elektron. Również opis kwantowy pojedynczego nukleonu atomu odniesiemy do środka masy całego jądra $A_k^{s.m.}$.

Środek masy $A_k^{s.m.}$ wykonuje ruch orbitalny i spinowy. Spinowy momentu pędu środka masy $A_k^{s.m.}$ policzymy ze wzoru: $S_k^{A_{s.m.}} = \sqrt{I_{S_{A_k}}^{s.m.}(I_{S_{A_k}}^{s.m.}+1)\hbar}$, gdzie $I_{S_{A_k}}^{s.m.} = \frac{1}{2}$ to liczba kwantowa ruchu spinowego środka masy $A_k^{s.m.}$. Składowa spinowego momentu pędu w kierunku prostopadłym do międzyatomowego oddziaływania będzie wynosić: $(S_k^{A_{s.m.}})^{\text{couple}} = S_k^{A_{s.m.}} \cos \varphi_k^{A_{s.m.}} = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Dodając spinowy i orbitalny moment pędu środka masy $A_k^{s.m.}$, otrzymujemy całkowity moment pędu jądra: $J_k^{A_{s.m.}} = \sqrt{I_{A_k}^{s.m.}(I_{A_k}^{s.m.}+1)}\hbar$, gdzie $I_{A_k}^{s.m.}$ to liczba kwantowa ruchu orbitalnego i spinowego środka masy $A_k^{s.m.}$ łącznie, która przyjmuje wartości $I_{A_k}^{s.m.} = 0, 1, ...$ lub $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, ...$ Przestrzenną kwantyzację całkowitego momentu pędu środka masy $A_k^{s.m.}$ względem wyróżnionego kierunku (w naszym przypadku jest to kierunek prostopadły do międzyatomowego oddziaływania) policzymy wg wzoru: $J_{A_k}^{couple} = J_{A_k} \cos \varphi_k^{A_{s.m.}} = \frac{\hbar}{2} \operatorname{mech}_{A_k}$, gdzie $\operatorname{mech}_{A_k}$ to liczba kwantowa która przyjmuje wartości $\operatorname{mech}_{A_k} = \pm I_{A_k}^{s.m.}, \pm (I_{A_k}^{s.m.} - 1), \dots, \pm \frac{1}{2} \operatorname{dla} I_{A_k}^{s.m.}$ o wartościach połówko-

wych i $\mathsf{mech}_{A_k} = \pm I_{A_k}^{s.m.}, \pm (I_{A_k}^{s.m.} - 1), \dots, 0 \text{ dla } I_{A_k}^{s.m.}$ o wartościach całkowitych.

Całkowite oddziaływanie momentowe atomu ze środkiem masy otrzymamy łącząc (75) i (76):

$$\boldsymbol{M}_{k}^{s.m.} = \boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{J}_{k}^{s.m.}$$
(77)

gdzie:

$$\boldsymbol{J}_{k}^{s.m.} = \boldsymbol{J}_{k}^{A_{s.m.}} + \boldsymbol{J}_{k}^{Z_{s.m.}}, \qquad \boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}} = \boldsymbol{\omega}_{A_{s.m}}^{\text{couple}} + \boldsymbol{\omega}_{Z_{s.m}}^{\text{couple}}$$
(78)

Jeżeli powłoki są całkowicie wypełnione elektronami a liczba nukleonów jest równa liczbom magicznym, to środek masy elektronów, nukleonów i środek masy całego atomu znajduje się w tym samym punkcie. Taki atom o budowie symetrycznej nie będzie wykazywał oddziaływania momentowego.

Pełny opisu operatora Hamiltona izolowanego układu atomów ze środkiem masy powinien zawierać dodatkowo operatory energii wynikające z modelu powłokowego jądra.

Model oddziaływań momentowych przedstawiony w tym podrozdziale ma charakter ogólny. W modelu przybliżonym, przedstawionym w rozdziale 1, pominięto oddziaływania momentowe jądrowe, a oddziaływania momentowe elektronów walencyjnych przedstawiono na ramieniu równym ich położeniu względem jądra.

3.2.3. Układ atomów ze środkiem masy

Układ wyjściowy atomów k-l ze środkiem masy przedstawia rys. 22.



Rys. 22. Układ wyjściowy atomów k-l ze środkiem mas elektronów i nukleonów

Z chwilą obciążenia takich atomów (rys. 23) wystąpi precesja środków mas elektronów i nukleonów. Oznaczając położenie środków mas atomów k i l jako $\mathbf{r}_{k}^{s.m.}$, $\mathbf{r}_{l}^{s.m.}$ oraz ich kąty precesji $(\mathbf{\phi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{k}$, $(\mathbf{\phi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{l}$, podobnie jak poprzednio oznaczymy przyrost kąta precesji w kierunku \overline{kl} :

$$(\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{kl} = (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_k - (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_l$$
(79)

i zapiszemy zmianę tego kąta względem odległości pomiędzy środkami mas:

$$\Theta_{kl}^{s.m.} = \frac{(\varphi_{s.m.}^{\text{couple}})_k - (\varphi_{s.m.}^{\text{couple}})_l}{r_l^{s.m.} - r_k^{s.m.}} = \frac{(\varphi_{s.m.}^{\text{couple}})_{kl}}{r_k^{s.m.}}$$
(80)



Rys. 23. Obciążony układ atomów k-l ze środkiem mas elektronów i nukleonów

Zapiszemy również naprężenie momentowe w punkcie k (stosując tym razem wzór na oddziaływanie momentowe w postaci pochodnej cząstkowej energii potencjalnej oddziaływań momentowych):

$$\boldsymbol{\mu}_{k}^{s.m.} = \frac{1}{dV} \frac{\partial U_{k}^{M}}{\partial (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{k}}$$
(81)

oraz przyrost naprężenia momentowego w kierunku \overline{kl} względem punktu k:

$$\boldsymbol{\mu}_{kl}^{s.m.} = \frac{1}{dV} \left[\frac{\partial (U_{s.m.}^{M})_{l}}{\partial (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{l}} - \frac{\partial (U_{s.m.}^{M})_{k}}{\partial (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{k}} \right]$$
(82)

Równania ruchu w punkcie *k* zapiszemy w postaci:

$$m_k \ddot{\boldsymbol{r}}_k^{s.m.} = \boldsymbol{P}_k \tag{83}$$

$$\dot{\boldsymbol{J}}_{k}^{s.m.} = \boldsymbol{M}_{k}^{s.m.} \tag{84}$$

gdzie:

$$\boldsymbol{P}_{k} = -\sum_{l \neq k}^{N} \nabla_{k} U^{P}(\boldsymbol{r}_{kl}^{s.m.}), \ \boldsymbol{M}_{k}^{s.m.} = \frac{\partial U_{k}^{M}}{\partial (\boldsymbol{\varphi}_{s.m.}^{\text{couple}})_{k}}.$$

4. Opis kwantowy ośrodka Cosseratów

Rozpatrzymy atom k z jednym elektronem [24]. Elektron ten będzie opisywał stan mechaniczny atomu k i dlatego w rozdziale tym zrezygnujemy z numeracji elektronów.

4.1. Oddziaływanie momentowe

W rozdziale 3 elektronowe oddziaływanie momentowe zdefiniowano na podstawie wzorów mechaniki klasycznej oraz w sposób półklasyczny wprowadzając formalnie do wzorów klasycznych wielkości kwantowe. Dla ścisłego opisu kwantowego rozwiązania te pozostają ważne ze względu na obowiązującą w fizyce zasadę korespondencji.

Ścisłe kwantowe rozwiązanie na oddziaływanie momentowe wyprowadzimy przy założeniu, że wystąpi "wygaszenie" momentu orbitalnego L_k w wyniku działania pola krystalicznego [49] w otoczeniu atomu k. Zjawisko "wygaszenia" momentu orbitalnego występuje w przyrodzie i zostało potwierdzone doświadczalnie dla jonów grupy żelaza.

Postępując według zasady stosowanej w mechanice kwantowej, spinowemu oddziaływaniu momentowemu M_k^s przyporządkujemy operator \hat{M}_k^s i zapiszemy równanie na wartości własne tego operatora w postaci:

$$\hat{M}_k^S \Phi_k^M = \mathbf{M}_k^S \Phi_k^M \tag{85}$$

gdzie:

 Φ_k^M – funkcja falowa.

Zgodnie z postulatem mechaniki kwantowej otrzymane z rozwiązania równania (85) wartości własne M_k^S operatora \hat{M}_k^S będą poszukiwanymi wielkościami fizycznymi oddziaływania M_k^S .

Zapisując operator \hat{M}_k^s , odniesiemy się do otrzymanych ścisłych rozwiązań mechaniki kwantowej, wg których określone wartości może mieć tylko jeden z rzutów momentu pędu na osie współrzędnych. Dwa pozostałe rzuty są całkowicie nieokreślone i nie możemy mówić o wektorze momentu pędu tak jak to przyjęto w mechanice klasycznej. Na podstawie powyższego, zapisując zależność klasyczną:

$$\boldsymbol{M}_{k}^{S} = (\boldsymbol{\omega}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{S})_{k} = \boldsymbol{i} \Big[\boldsymbol{\omega}_{y}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{z})_{k} - \boldsymbol{\omega}_{z}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{y})_{k} \Big] - \boldsymbol{j} \Big[\boldsymbol{\omega}_{x}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{z})_{k} - \boldsymbol{\omega}_{z}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{x})_{k} \Big] + \boldsymbol{k} \Big[\boldsymbol{\omega}_{x}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{y})_{k} - \boldsymbol{\omega}_{y}^{\text{couple}}(\boldsymbol{S}_{x})_{k} \Big]$$
(86)

wyznaczymy określoną (wg rozwiązań ścisłych mechaniki kwantowej) wartość operatora kwantowego oddziaływania momentowego dla wybranego rzutu momentu pędu $(S_{\cdot})_{k}$:

$$\hat{\boldsymbol{M}}_{k}^{S_{z}} = (\boldsymbol{i}\omega_{y}^{\text{couple}} - \boldsymbol{j}\omega_{x}^{\text{couple}}) \left(\hat{\boldsymbol{S}}_{z}\right)_{k}$$
(87)

Operator (87) zapiszemy w postaci:

$$\hat{\boldsymbol{M}}_{k}^{S_{z}} = \boldsymbol{\Omega}_{k}^{S_{z}} \left(\hat{\boldsymbol{S}}_{z} \right)_{k}$$
(88)

gdzie:

$$\boldsymbol{\Omega}_{k}^{S_{z}} = (\boldsymbol{i}\boldsymbol{\omega}_{y}^{\text{couple}} - \boldsymbol{j}\boldsymbol{\omega}_{x}^{\text{couple}})$$

Równanie własne operatora oddziaływania momentowego dla składowej momentu pędu wzdłuż wyróżnionego kierunku z zapiszemy w postaci:

$$\Omega_k^{S_z} \left(\hat{S}_z \right)_k (\Phi_z^M)_k = \mathbf{M}_k^{S_z} (\Phi_z^M)_k \tag{89}$$

Sprzężenie z oddziaływaniem siłowym P_{μ} opisuje warunek (15).

Dobierając operator spinu w postaci macierzy Pauliego:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{90}$$

oraz spinową funkcję falową w postaci:

$$\Phi_{z}^{M} = \begin{cases} \Phi_{z}^{M} \uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{dla } \operatorname{mech}_{S_{z}} = \frac{1}{2} \\ \Phi_{z}^{M} \downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{dla } \operatorname{mech}_{S_{z}} = -\frac{1}{2} \end{cases}$$
(91)

gdzie $\operatorname{mech}_{S_z}$ to mechaniczna spinowa liczba kwantowa w kierunku *z*, zapiszemy równanie:

$$\left(\hat{S}_{z}\right)_{k} (\Phi_{z}^{M})_{k} = \hbar(\mathsf{mech}_{S_{z}})_{k} (\Phi_{z}^{M})_{k}$$
(92)

spełnione tożsamościowo.

Na podstawie podobieństwa równań (89) i (92) funkcje własne w tych równaniach będą identyczne. Zapisując wartości własne równania (89), przedstawimy jednocześnie poszukiwany wzór na kwantowe oddziaływanie momentowe:

$$\mathbf{M}_{k}^{S_{z}} = \Omega_{k}^{S_{z}} \hbar(\mathsf{mech}_{S_{z}})_{k} \tag{93}$$

Jeżeli atom k jest obciążony hydrostatycznie, to spełnione będą zależności:

$$(P_{x})_{k} = (P_{y})_{k} = (P_{z})_{k} = P_{k}$$
(94)

$$(\omega_x^{\text{couple}})_k = (\omega_y^{\text{couple}})_k = (\omega_z^{\text{couple}})_k = \omega_S^{\text{couple}}$$
(95)

i zapiszemy wzór na oddziaływanie momentowe w postaci:

$$\mathbf{M}_{k}^{S_{z}} = \hbar \sqrt{2} (\boldsymbol{\omega}_{S}^{\text{couple}} \mathsf{mech}_{S_{z}})_{k}$$
(96)

Dla $(\mathsf{mech}_{S_z})_k = \pm \frac{1}{2}$ otrzymamy wzór:

$$\mathbf{M}_{k}^{S_{z}} = \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar(\boldsymbol{\omega}_{S}^{\text{couple}})_{k}$$
(97)

identyczny jak w opisie klasycznym – wzór (18) – spełniając tym samym zasadę korespondencji. Kwantowe wartości oddziaływania momentowego wynoszą:

$$(\operatorname{mech}_{S_z})_k = +\frac{1}{2}, \qquad (M_k^{S_z})^+ = +\frac{\hbar}{2}\Omega_k^{S_z}$$
 (98)

$$(\mathsf{mech}_{S_z})_k = -\frac{1}{2}, \qquad (\mathsf{M}_k^{S_z})^- = -\frac{\hbar}{2}\Omega_k^{S_z}$$
(99)

Według opisu kwantowego w polu oddziaływań spowodowanych mechaniczną zmianą odległości pomiędzy atomami występują rozdzielone wartości oddziaływania momentowego $(M_k^{S_z})^+$ oraz $(M_k^{S_z})^-$ ze względu na spinową mechaniczną liczbę kwantową mech_{S_z}.

Dla elektronu będącego jednocześnie w ruchu orbitalnym i spinowym, analogicznie do rozwiązania (93), oddziaływanie momentowe opiszemy wzorem:

$$\mathbf{M}_k = \Omega_k \hbar(\mathsf{mech}_{J_z})_k \tag{100}$$

gdzie wektor $\Omega_k = \vec{i} (\omega_y^{\text{couple}})_k - \vec{j} (\omega_x^{\text{couple}})_k$ będzie teraz związany z precesją ruchu orbitalnego i spinowego łącznie.

4.2. Energia spinu

Energię spinu S_k elektronu w warunkach obciążenia mechanicznego P_k , przy wygaszonym ruchu orbitalnym, zapiszemy w postaci:

$$U_k^S = -\boldsymbol{\omega}_k^{\text{couple}} \boldsymbol{S}_k \tag{101}$$

Na podstawie równania (101) zapiszemy operator spinowego momentu pędu i formułę na wartości własne energii przedstawimy w postaci:

$$\omega_k^{\text{couple}} \, \hat{S}_k \, \Phi_k^U = \mathbf{U}_k^S \Phi_k^U \tag{102}$$

gdzie:

 Φ_k^U – funkcja falowa,

 U_k^S – wartości własne wprowadzonego operatora energii.

Równanie (102) zapiszemy dla wyróżnionego kierunku z:

$$(\omega_{S_z}^{\text{couple}})_k \left(\hat{S}_z \right)_k (\Phi_z^U)_k = (\mathbf{U}_z^S)_k (\Phi_z^U)_k$$
(103)

Podobnie jak poprzednio, wprowadzając operator Pauliego (90) i funkcję falową (91), zapiszemy równanie:

$$\left(\hat{S}_{z}\right)_{k} (\Phi_{z}^{U})_{k} = \hbar(\mathsf{mech}_{S_{z}})_{k} (\Phi_{z}^{U})_{k}$$
(104)

spełnione tożsamościowo. Na podstawie podobieństwa równań (103) i (104) przedstawimy energię spinu:

$$(\mathbf{U}_{z}^{S})_{k} = (\boldsymbol{\omega}_{S_{z}}^{\text{couple}})_{k} \,\hbar(\mathsf{mech}_{S_{z}})_{k} \tag{105}$$

Wobec powyższego w warunkach obciążenia mechanicznego dla ośrodka Cosseratów należy spodziewać się rozszczepienia stanu energetycznego atomu, ze względu na mechaniczną spinową liczbę kwantową (mech_{s_z})_k = ±1/2, na poziomy o energiach:

$$(\mathsf{mech}_{S_z})_k = \frac{1}{2}, \quad (\mathbf{U}_{S_z}^{+1/2})_k = (\mathbf{U}_{S_z}^o)_k + \frac{\hbar}{2} (\omega_{S_z}^{\mathrm{couple}})_k$$
(106)

$$(\mathsf{mech}_{S_z})_k = -\frac{1}{2}, \quad (\mathbf{U}_{S_z}^{-1/2})_k = (\mathbf{U}_{S_z}^o)_k - \frac{\hbar}{2} (\omega_{S_z}^{\mathrm{couple}})_k$$
(107)

gdzie:

 $(\mathbf{U}_{S_z}^o)_k$ – energia niezaburzona.

Różnicę energii pomiędzy sąsiednimi poziomami energetycznymi przedstawimy w postaci:

$$\Delta(\mathbf{U}_{S_z})_k = \hbar(\boldsymbol{\omega}_{S_z}^{\text{couple}})_k \tag{108}$$

Dla rozszczepionej energii (106), (107) otrzymamy linie widmowe o częstościach:

$$(\omega_{S_z}^{+1/2})_k = \omega_k^o + \frac{(\omega_{S_z}^{\text{couple}})_k}{2}$$
(109)

$$(\omega_{S_{z}}^{-1/2})_{k} = \omega_{k}^{o} - \frac{(\omega_{S_{z}}^{\text{couple}})_{k}}{2}$$
(110)

gdzie:

 ω_k^o – prędkość kątowa elektronu niezaburzonego.

Wzór (108) będzie stosowany do interpretacji widm w spektrometrze EPR, a wzory (109), (110) w opisie obrotowej (chiralnej) dwójłomności wymuszonej.

4.3. Energia ruchu orbitalnego

Dla ruchu orbitalnego elektronu zapiszemy energię Hamiltona w postaci:

$$H_k^L = \frac{1}{2m_e} (\boldsymbol{p}_k + \boldsymbol{p}_k^{\text{couple}})^2 + V_k$$
(111)

gdzie:

 p_k – orbitalny pęd elektronu, p_k^{couple} – dodatkowy pęd wynikający z oddziaływań mechanicznych, $V_k = -e^{2/4}\pi\kappa_o\rho_k$ – potencjał Coulomba.

Formułę (111) zapiszemy w formie:

$$H_{k}^{L} = \frac{1}{2m_{e}} \boldsymbol{p}_{k}^{2} + \frac{1}{2m_{e}} (\boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}})^{2} + \frac{1}{2m_{e}} (\boldsymbol{p}_{k} \boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} + \boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} \boldsymbol{p}_{k}) + V_{k}$$
(112)

Pęd zaburzenia mechanicznego przedstawimy w postaci:

$$\boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} = \boldsymbol{m}_{e} \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ (\boldsymbol{\omega}_{L_{x}}^{\text{couple}})_{k} & (\boldsymbol{\omega}_{L_{y}}^{\text{couple}})_{k} & (\boldsymbol{\omega}_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k} \\ \boldsymbol{x} & \boldsymbol{y} & \boldsymbol{z} \end{vmatrix}$$
(113)

i na podstawie powyższego wyrażenia otrzymamy:

$$\boldsymbol{p}_{k} \boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} + \boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} \boldsymbol{p}_{k} = 2m_{e}(p_{x})_{k} (\omega_{L_{y}}^{\text{couple}})_{k} z - 2m_{e}(p_{x})_{k} (\omega_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k} y + - 2m_{o}(p_{y})_{k} (\omega_{L_{x}}^{\text{couple}})_{k} z + 2m_{o}(p_{y})_{k} (\omega_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k} x + (114) + 2m_{o}(p_{z})_{k} (\omega_{L_{x}}^{\text{couple}})_{k} y - 2m_{o}(p_{z})_{k} (\omega_{L_{y}}^{\text{couple}})_{k} x$$

Grupując składniki, w których występują te same składowe prędkości kątowej oddziaływań momentowych, otrzymujemy:

$$p_{k}p_{k}^{\text{couple}} + p_{k}^{\text{couple}}p_{k} = 2m_{e}(\omega_{L_{x}}^{\text{couple}})_{k}(y(p_{z})_{k} - z(p_{y})_{k}) + + 2m_{e}(\omega_{L_{y}}^{\text{couple}})_{k}(z(p_{x})_{k} - x(p_{z})_{k}) + + 2m_{e}(\omega_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k}(x(p_{y})_{k} - y(p_{x})_{k})$$
(115)

Ze względu na to, że: $L_x = (-zp_y + yp_z)$, $L_y = (-zp_x + xp_z)$, $L_z = (-yp_x + xp_y)$, ostatecznie wyrażenie (115) zapiszemy jako:

$$\boldsymbol{p}_{k}\boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}} + \boldsymbol{p}_{k}^{\text{couple}}\boldsymbol{p}_{k} = 2m_{e}(\omega_{L_{x}}^{\text{couple}})_{k}(L_{x})_{k} + 2m_{e}(\omega_{L_{y}}^{\text{couple}})_{k}(L_{y})_{k} + 2m_{e}(\omega_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k}(L_{z})_{k}$$

$$(116)$$

Formułę (116) podstawimy do wzoru (112) i pomijając zaburzenia nieliniowe, otrzymamy energię Hamiltona atomu z uwzględnieniem mechanicznych oddziaływań w postaci:

$$H_k^L = \frac{1}{2m_e} p_k^2 + \boldsymbol{\omega}_{L_k}^{\text{couple}} \boldsymbol{L}_k + V_k$$
(117)

Zapiszemy składowe energii (117) w kartezjańskim układzie współrzędnych (x, y, z):

$$(H_k^L)_i = \frac{1}{2m_e} (p_k)_i^2 + (\omega_{L_k}^{\text{couple}})_i (L_k)_i + (V)_i, \quad i = x, y, z$$
(118)

Podstawiając w miejsce składowych pędu p_i operatory tych składowych:

$$\hat{p}_i = \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \nabla_i, \quad i = x, y, z \tag{119}$$

oraz w miejsce momentów pędu operatory:

$$\hat{L}_{x} = \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_{y} = \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{L}_{z} = \frac{\hbar}{\sqrt{-1}} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$
(120)

przedstawimy operator Hamiltona dla wybranego kierunku z w postaci:

$$\left(\hat{H}_{L_z}\right)_k = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_z^2 + (\omega_{L_z}^{\text{couple}})_k \left(\hat{L}_z\right)_k + V_k$$
(121)

Operator (121) przepiszemy w formie:

$$\left(\hat{H}_{L_z}\right)_k = \left(\hat{H}_{L_z}^o\right)_k + (\omega_{L_z}^{\text{couple}})_k \left(\hat{L}_z\right)_k$$
(122)

gdzie: $\left(\hat{H}_{L_{z}}^{o}\right)_{k} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{e}}\nabla_{z}^{2} + V_{k}$ oznaczono jako część niezaburzoną. Równania na

wartości własne składowych zaburzonej energii ruchu orbitalnego elektronu znajdującego się w polu wywołanym mechaniczną zmianą odległości między atomami przedstawimy w postaci:

$$\left(\hat{H}_{L_z}\right)_k (\Psi_{L_z})_k = (U_{L_z})_k (\Psi_{L_z})_k$$
(123)

Rozwiązaniem równania (123) jest energia stanu atomu [24]:

$$(\mathbf{U}_{L_z})_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k + (\omega_{L_z}^{\text{couple}})_k \hbar(\mathsf{mech}_{L_z})_k$$
(124)

gdzie:

 $(\mathbf{U}_{L_z}^o)_k$ – niezaburzona energia ruchu orbitalnego składowej z.

Przykładowo dla elektronu opisanego liczbami kwantowymi $I_k = 1$, $(\text{mech}_{L_k})_k = 0, \pm 1$ mamy trzy poziomy energii:

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = -1, \quad (\mathbf{U}_{L_z})_k = (\mathbf{U}_{L_z})_k - (\omega_{L_z}^{\mathrm{couple}})_k \hbar$$
 (125)

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = 0, \quad (\mathbf{U}_{L_z}^0)_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k$$
(126)

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = +1, \quad (\mathbf{U}_{L_z}^{+1})_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k + (\omega_{L_z}^{\mathrm{couple}})_k \hbar$$
 (127)

Poziomy te dają trzy linie widmowe o częstościach:

$$(\omega_{L_z}^{-1})_k = \omega_k^o - (\omega_{L_z}^{\text{couple}})_k$$
(128)

$$(\omega_{L_z}^0)_k = \omega_k^o \tag{129}$$

$$(\omega_{L_z}^{+1})_k = \omega_k^o + (\omega_{L_z}^{\text{couple}})_k \tag{130}$$

Wzory (128)–(130) znajdą zastosowanie w opisie obrotowej (chiralnej) dwójłomności wymuszonej.

Różnica pomiędzy sąsiednimi poziomami energetycznymi opisanymi wzorami (125)–(127) wynosi:

$$\Delta(\mathbf{U}_{L_{z}})_{k} = (\omega_{L_{z}}^{\text{couple}})_{k}\hbar \tag{131}$$

Rozpatrując słabe pola mechaniczne (zakres sprężysty) i atomy, w których dominuje sprzężenie *LS*, analogicznie do wzorów (108) i (131) zapiszemy różnicę poziomów energetycznych atomu z całkowitym momentem pędu dla ruchów orbitalnego i spinowego łącznie [24]:

$$\Delta(\mathbf{U}_z)_k = (\omega_{J_z}^{\text{couple}})_k \hbar \tag{132}$$

Wzór (132) będziemy stosować w interpretacji widm rezonansowych otrzymanych w spektrometrze EPR.

4.4. Pole magnetyczne

Dodatkowy ruch elektronów walencyjnych w postaci precesji orbit elektronowych jest źródłem dodatkowego pola magnetycznego $\boldsymbol{B}_{k}^{\text{couple}}$ (rys. 24). Pole to dla atomu *k* możemy wyznaczyć zapisując energię zaburzonego atomu [33] w postaci:

$$U_k^M = -\boldsymbol{\omega}_k^{\text{couple}} \boldsymbol{J}_k = -(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k \boldsymbol{B}_k^{\text{couple}}$$
(133)

gdzie:

 $(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k$ – moment magnetyczny atomu k.

Wobec równości kątów: $\sphericalangle(\boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}}, \boldsymbol{J}_{k}) = \sphericalangle\left[(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_{J}})_{k}, \boldsymbol{B}_{k}^{\text{couple}}\right]$ (rys.24) zapiszemy:

$$\omega_k^{\text{couple}} J_k = (p_{m_j})_k B_k^{\text{couple}}$$
(134)

i wyznaczymy wartość indukcji magnetycznej pochodzącą od oddziaływań momentowych:

$$B_k^{\text{couple}} = \frac{J_k}{(p_{m_j})_k} \omega_k^{\text{couple}}$$
(135)

Do wzoru (135) podstawimy $J_k = \hbar \sqrt{J(J+1)}$ oraz $(p_{m_J})_k = g_k \mu_B \sqrt{J(J+1)}$, gdzie: g_k to czynnik rozszczepienia spektroskopowego związany z działaniem naprężonej siatki krystalicznej (w ogólnym przypadku czynnik ten występuje w postaci tensora niesymetrycznego), $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ to magneton Bohra. Dla atomu odosobnionego, kiedy znika działanie naprężonej siatki krystalicznej czynnik g_k przechodzi w czynnik Landego $g^L = \frac{3(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$, który dla ruchu orbitalnego, S = 0, J = L, wynosi: $g^L = 1$ i przekształcając wzór (135), otrzymujemy znaną postać wzoru Larmora: $\omega_k^{\text{couple}} = \frac{e}{2m} B_k^{\text{couple}}$.

4.5. Energia pola magnetycznego

Zapiszemy energię atomu w warunkach obciążenia mechanicznego w postaci:

$$U_k^M = -(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k \boldsymbol{B}_k^{\text{couple}} = -(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k \boldsymbol{B}_k^{\text{couple}} \cos((\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J})_k, \boldsymbol{B}_k^{\text{couple}}) = -(\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{m}_J}^{\text{couple}})_k \boldsymbol{B}_k^{\text{couple}}$$
(136)

Odwołując się do postulatu na temat ścisłych rozwiązań mechaniki kwantowej, zapiszemy składową magnetycznego momentu w wyróżnionym kierunku *z*:

$$(p_{m_{J_z}}^{\text{couple}})_k = -g_k \mu_B (\mathsf{mech}_{J_z})_k \tag{137}$$

i podstawiając (137) do (136), otrzymujemy:

$$U_k^M = g_k \mu_B(\mathsf{mech}_{J_z}) (B_z^{\mathrm{couple}})_k$$
(138)

Dla ruchu orbitalnego atomu z jednym elektronem, opisanego liczbami kwantowymi $I_k = 1$, (mech_L)_k = ±1/2, mamy trzy poziomy energii:

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = -1, \quad (\mathbf{U}_{L_z}^{-1})_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k - (g_{L_z})_k \mu_B (B_{L_z}^{\text{couple}})_k \tag{139}$$

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = 0, \quad (\mathbf{U}_{L_z}^0)_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k$$
(140)

$$(\mathsf{mech}_{L_z})_k = +1, \quad (\mathbf{U}_{L_z}^{+1})_k = (\mathbf{U}_{L_z}^o)_k + (g_{L_z})_k \mu_B (B_{L_z}^{\text{couple}})_k \tag{141}$$

Różnicę energii pomiędzy dwoma sąsiednimi poziomami zapiszemy w postaci:

$$\Delta(\mathbf{U}_{L_z})_k = (g_{L_z})_k \mu_B B_k^{\text{couple}}$$
(142)

Kiedy ruch orbitalny jest wygaszony, rozpatrujemy energię spinową atomu z jednym elektronem dla liczb kwantowych (mech_L)_k = $\pm 1/2$, w postaci wzorów:

$$(\mathsf{mech}_{S_z})_k = \frac{1}{2}, \qquad (\mathbf{U}_{S_z}^{+1/2})_k = (\mathbf{U}_{S_z}^o)_k + \frac{1}{2}(g_{s_z})_k \mu_B(B_{S_z}^{\text{couple}})_k$$
(143)

$$(\mathsf{mech}_{S_z})_k = -\frac{1}{2}, \qquad (\mathbf{U}_{S_z}^{+1/2})_k = (\mathbf{U}_{S_z}^o)_k - \frac{1}{2}(g_{s_z})_k \,\mu_B(B_{S_z}^{\mathrm{couple}})_k \tag{144}$$

i zapisujemy różnicę energii pomiędzy dwoma sąsiednimi poziomami:

$$\Delta(\mathbf{U}_{S_z})_k = (g_{s_z})_k \mu_B(B_{S_z}^{\text{couple}})_k \tag{145}$$

Analogicznie, dla łącznego ruchu orbitalnego i spinowego (sprzężenie *LS*) atomu o numerze *k* zapiszemy [24]:

$$\hbar(\omega_z^{\text{couple}})_k = g_k \mu_B (B_z^{\text{couple}})_k \tag{146}$$

gdzie składowa $(\omega_z^{\text{couple}})_k$ odnosi się teraz do precesji wektora J_k , a zarazem $(p_{m_J})_k$ całego atomu k (rys. 24). $(B_z^{\text{couple}})_k$ to składowa pola magnetycznego pochodząca od łącznego ruchu orbitalnego i spinowego elektronu.



Rys. 24. Pole magnetyczne oddziaływań momentowych: A) na poziomie elektronu, B) na poziomie atomu

W przypadku obciążenia hydrostatycznego atomu, wprowadzając oznaczenia:

$$\left(\omega_z^{\text{couple}}\right)_k = \omega_k^{\text{couple}} \tag{147}$$

$$(B_z^{\text{couple}})_k = B_k^{\text{couple}}$$
(148)

warunek (145) zapiszemy w postaci:

$$\hbar \omega_k^{\text{couple}} = g_k \mu_B B_k^{\text{couple}} \tag{149}$$

Wzór (149) również znajdzie zastosowanie w opisie atomów niesymetrycznych w spektrometrze EPR (rozdział 9).

54

5. Analiza makroskopowych własności ośrodka Cosseratów na podstawie rozkładu Boltzmanna

Zapiszemy energię potencjalną uzyskaną przez atom k w polu mechanicznym w funkcji mechanicznej liczby kwantowej. Kierunkiem kwantowania jest kierunek wektora precesji a układ współrzędnych dobieramy tak, aby kierunek ten pokrywał się z osią z:

$$U(\mathsf{mech}_{J_z})_k = -\omega_k^{\mathrm{couple}} J_k = -\omega_k^{\mathrm{couple}} J_k \cos(\omega_k^{\mathrm{couple}}, J_k) = -\omega_k^{\mathrm{couple}} J_k^{\mathrm{couple}} =$$

= $-(\omega_z^{\mathrm{couple}} \hbar \mathsf{mech}_{J_z})_k$ (150)

Ilość atomów mających w objętości dVenergię opisaną liczbą kwantową **mech**_{J_z} jest proporcjonalna do funkcji rozkładu Boltzmanna:

$$N(\mathsf{mech}_{J_z}) \sim \exp\left[-\frac{U(\mathsf{mech}_{J_z})}{kT}\right]$$
(151)

gdzie:

k – stała Boltzmanna,

T – temperatura.

Zapisując takie funkcje dla wszystkich dostępnych poziomów energetycznych atomu opisywanych liczbami kwantowymi: $\operatorname{mech}_{J_z} = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, J-1, J$ i dodając je do siebie, otrzymamy sumę proporcjonalną do liczby *N* wszystkich atomów w objętości *dV* (zakładamy możliwość obsadzenia wszystkich możliwych poziomów energetycznych):

$$N \sim \sum_{\text{mech}_{J_z}=-J}^{\text{mech}_{J_z}=J} \exp\left[-\frac{U(\text{mech}_{J_z})}{kT}\right]$$
(152)

Na podstawie (151) i (152) zapiszemy prawdopodobieństwo wystąpienia atomu o orientacji $mech_J$:

$$\Pi(\mathsf{mech}_{J_z}) = \frac{N(\mathsf{mech}_{J_z})}{N} = \frac{\exp\left[-\frac{U(\mathsf{mech}_{J_z})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[-\frac{U(\mathsf{mech}_{J_z})}{kT}\right]}$$
(153)

Wartość oczekiwaną dowolnej wielkości $\mathbb{R}(\mathsf{mech}_{J_z})$ będącej funkcją mech_{J_z} , ze zbioru atomów k = 1, 2, 3, ... N w objętości dV wyznaczymy ze wzoru:

$$\left\langle \mathbb{R}(\mathsf{mech}_{J_z}) \right\rangle = \sum_{\mathsf{mech}_{J_z}=-J}^{\mathsf{mech}_{J_z}=-J} \mathbb{R}(\mathsf{mech}_{J_z}) \Pi(\mathsf{mech}_{J_z})$$
(154)

5.1. Wartość oczekiwana oddziaływania momentowego

Objętość dV dobieramy tak, aby oddziaływania siłowe między atomami miały prawie równe sobie wartości $P_k \sim P$, k = 1, 2, 3, ..., N. Wówczas zapiszemy: $(\omega^{\text{couple}})_k \sim \omega^{\text{couple}}$ oraz $\Omega_k \sim \Omega$. Im większy jest gradient oddziaływania P_k , tym mniejsza będzie ilość atomów spełniających powyższy warunek (w granicznym przypadku będzie to objętość atomu).

Na podstawie wzorów (100) oraz (153) przedstawimy wartość oczekiwaną oddziaływania momentowego w wyróżnionym kierunku z dla układu k=1,2,3,...Natomów w objętości dV pod wpływem zewnętrznego obciążenia mechanicznego:

$$\left\langle \mathbf{M}_{k}\right\rangle = \sum_{-J}^{J} \Pi(\mathsf{mech}_{J_{z}}) \mathbf{M}_{k}(\mathsf{mech}_{J_{z}}) = \hbar \Omega \frac{\sum_{-J}^{J} \mathsf{mech}_{J_{z}} \exp\left[-\frac{U(\mathsf{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[-\frac{U(\mathsf{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]} \quad (155)$$

Ułamek we wzorze (155) przedstawimy na podstawie wzoru (150):

$$\frac{\sum_{-J}^{J} \operatorname{mech}_{J_{z}} \exp\left[-\frac{U(\operatorname{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[-\frac{U(\operatorname{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]} = \frac{\sum_{-J}^{J} \operatorname{mech}_{J_{z}} \exp\left[\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar \operatorname{mech}_{J_{z}}}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[-\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar \operatorname{mech}_{J_{z}}}{kT}\right]}$$
(156)

Traktując wyrażenie $\frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT}$ jako zmienną, ułamek ten zapiszemy dalej w postaci:

$$\frac{\sum_{-J}^{J} \operatorname{mech}_{J_{z}} \exp\left(\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar \operatorname{mech}_{J_{z}}}{kT}\right)}{\sum_{-J}^{J} \exp\left(\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar \operatorname{mech}_{J_{z}}}{kT}\right)} = \frac{d}{d\left(\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar}{kT}\right)} \ln \sum_{-J}^{J} \exp\left(\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}} \hbar \operatorname{mech}_{J_{z}}}{kT}\right) (157)$$

Licząc sumę we wzorze (157) [33]:

$$\sum_{-J}^{J} \exp\left(\mathsf{mech}_{J_z} \frac{\omega_z^{\mathrm{couple}}\hbar}{kT}\right) = \frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_z^{\mathrm{couple}}\hbar}{kT}\right)}{\sinh\left(\frac{\omega_z^{\mathrm{couple}}\hbar}{2kT}\right)}$$
(158)

zapiszemy:

$$\frac{d}{d\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)}\ln\sum_{-J}^{J}\exp\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar\text{mech}_{J_{z}}}{kT}\right) = \frac{d}{d\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)}\left[\ln\frac{\frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)}{\sinh\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{2kT}\right)}\right]$$
(159)

Licząc pochodną ze wzoru (159) [33]:

$$\frac{d}{d\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)} \left[\ln \frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)}{\sinh\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{2kT}\right)} \right] =$$

$$= J \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh}\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right) - \frac{1}{2J}\operatorname{ctgh}\left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}}\hbar}{2kT}\right) \right]$$
(160)

ułamek we wzorze (155) przedstawimy ostatecznie w postaci:

$$\frac{\sum_{J=J}^{J} \operatorname{mech}_{J_{z}} \exp\left[\frac{U(\operatorname{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]}{\sum_{J=J}^{J} \exp\left[\frac{U(\operatorname{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]} = JB_{J}$$
(161)

gdzie wyrażenie $\mathbf{B}_{J} = \left[\frac{2J+1}{2J}\operatorname{ctgh}\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}}\hbar}{kT}\right) - \frac{1}{2J}\operatorname{ctgh}\left(\frac{\omega_{z}^{\operatorname{couple}}\hbar}{2kT}\right)\right]$ jest funk-

cją analogiczną do funkcji Brillouna [32]. Wobec powyższego zapiszemy wzór na wartość oczekiwaną oddziaływania momentowego dla objętości dV badanego materiału:

$$\left\langle \mathbf{M}_{k}\right\rangle =\hbar\Omega \mathbf{J}\mathbf{B}_{J} \tag{162}$$

Wzór na oddziaływanie momentowe w odniesieniu do objętości dV (rys. 1) otrzymamy mnożąc wyrażenie $\langle \mathbf{M}_k \rangle$ przez ilość *N* atomów zajmujących objętość dV:

$$d\boldsymbol{M}_{V}^{\text{couple}} = N \left\langle \mathbf{M}_{k} \right\rangle = N \hbar \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{J} \mathbf{B}_{J}$$
(163)

Jeżeli uwzględnimy ilość N' atomów wypełniających powierzchnię dA, to zapiszemy oddziaływanie momentowe odniesione do jednostki powierzchni:

$$d\boldsymbol{M}^{\text{couple}} = N' \langle \mathbf{M}_k \rangle = N' \hbar \boldsymbol{\Omega} J \mathbf{B}_I$$
(164)

5.1.1. Wektor naprężenia momentowego

Wprowadzając współczynnik koncentracji atomów w jednostce objętości N = N/dV, otrzymamy makroskopowy wektor oddziaływania momentowego w odniesieniu do jednostki objętości:

$$\mathbf{m}_{V}^{\text{couple}} = N\hbar\mathbf{\Omega}\mathbf{J}\mathbf{B}_{J}$$
(165)

Sprzężenie wektora $\mathbf{m}_{V}^{\text{couple}}$ z oddziaływaniem siłowym występuje we wzorze (164) w sposób niejawny poprzez warunek prostopadłości: $\boldsymbol{\omega}^{\text{couple}} \boldsymbol{P} = 0.$

Jeżeli średnie oddziaływanie momentowe atomu odniesiemy do objętości molowej V_{N_A} , to możemy mówić o molowym wektorze oddziaływania momentowego atomów danego pierwiastka:

$$\mathbf{m}_{N_{A}}^{\text{couple}} = \frac{N_{A}}{V_{N_{A}}} \,\hbar\mathbf{\Omega} J \mathbf{B}_{J} \tag{166}$$

gdzie:

 $N_4 = 6,0221367 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} - \text{liczba Avogadry.}$

Podobnie jak w przypadku wzoru (23), wielkość tę wyznaczoną dla tych samych obciążeń różnych pierwiastków, możemy traktować jako miarę zdolności zbioru atomów pierwiastka do formowania wektora oddziaływania momentowego.

Zapiszemy pełny wzór na makroskopowy wektor oddziaływania momentowego w odniesieniu do jednostki objętości:

$$\mathbf{m}_{V}^{\text{couple}} = \mathrm{N}\hbar J \Omega \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2} \frac{\omega_{z}^{\text{couple}} \hbar}{kT} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{\omega_{z}^{\text{couple}} \hbar}{2kT} \right) \right] \quad (167)$$

Dla obciążenia hydrostatycznego $\omega_x^{\text{couple}} = \omega_y^{\text{couple}} = \omega_z^{\text{couple}} = \omega_z^{\text{couple}}$ wzór (167) zapiszemy w postaci:

$$N\hbar\sqrt{2}\omega^{\text{couple}}J\left[\frac{2J+1}{2J}\operatorname{ctgh}\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right)-\frac{1}{2J}\operatorname{ctgh}\left(\frac{\omega^{\text{couple}}\hbar}{2kT}\right)\right] (168)$$

Jeżeli spełniony jest warunek:

 $\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} =$

$$\frac{\omega^{\text{couple}}\hbar}{kT} \ll 1 \tag{169}$$

po rozwinięciu cotangensów hiperbolicznych występujących w równaniu (168) w szereg [33] i pozostawieniu tylko pierwszych dwóch wyrazów otrzymamy:

$$\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} = N\sqrt{2}\hbar^{2}\omega^{\text{couple}} \frac{J(J+1)}{3kT}\boldsymbol{\omega}^{\text{couple}}$$
(170)

Kiedy precesja atomu odbywa się przy wygaszeniu ruchu orbitalnego J = S = 1/2, to na podstawie (170) zapiszemy:

$$\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} = \mathrm{N} \frac{\sqrt{2}}{4} \boldsymbol{\omega}^{\text{couple}} \frac{\hbar^{2}}{kT} \boldsymbol{\omega}^{\text{couple}}$$
(171)

W bardzo niskich temperaturach i przy bardzo silnych oddziaływaniach mechanicznych między atomami (z zachowaniem oddziaływań sprężystych), kiedy spełnione są warunki:

$$T < 1K, \quad \frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT} \gg 1$$
 (172)

otrzymamy zależności:

$$\lim_{T < 1K, \frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT} \gg 1} \operatorname{ctgh}\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT}\right) = 1$$

$$\lim_{T < 1K, \frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT} \gg 1} \operatorname{ctgh}\left(\frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{2kT}\right) = 1$$
(173)

i wzór (167) na wektor naprężenia momentowego przedstawimy w postaci:

$$\mathbf{m}_{V}^{\text{couple}} = N\hbar\mathbf{\Omega}J \tag{174}$$

Zapiszemy energię potencjalną oddziaływania momentowego atomu k:

$$U_k^M = -\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{P} \tag{175}$$

gdzie $\rho = \rho_k^{s.m.}$. Porównując wzory (14) i (175), zapiszemy:

$$\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\omega}_{k}^{\text{couple}} \boldsymbol{J}_{k} \tag{176}$$

Wobec równości kątów $\varphi_k^{\text{couple}} = \measuredangle(\rho, P) = \measuredangle(\omega_k^{\text{couple}}, J_k)$ wzór (176) przedstawimy w formie zależności:

$$\frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT} = \frac{\rho P}{kT\sqrt{J(J+1)}}$$
(177)

którą podstawimy do (168) i otrzymamy:

$$\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} = N\sqrt{2} \frac{J\rho P}{\sqrt{J(J+1)}} \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2J\sqrt{J(J+1)}} \frac{\rho P}{kT} \right) + \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{1}{2\sqrt{J(J+1)}} \frac{\rho P}{kT} \right) \right]$$
(178)

Jeżeli ilość atomów odniesiemy do jednostki powierzchni *dA*, to możemy zapisać wzór na wektor naprężenia siłowego (z pominięciem defektów budowy krystalicznej badanego materiału) w postaci:

$$\mathbf{p} = \mathbf{N}' \mathbf{P} \tag{179}$$

gdzie:

N' = N'/dA – koncentracja atomów na jednostkę powierzchni.

Odpowiadający wielkości **p** wektor naprężenia momentowego (również na jednostkę powierzchni) zapiszemy na podstawie (178) i (179):

$$\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} = \frac{\sqrt{2}J\rho}{\sqrt{J(J+1)}} \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2J\sqrt{J(J+1)}} \frac{\rho P}{kT} \right) + \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{1}{2\sqrt{J(J+1)}} \frac{\rho P}{kT} \right) \right] \mathbf{p}$$
(180)

Oddziaływanie P lub jego średnią wartość $\langle P \rangle$ dla ciał stałych wyznaczamy z potencjału oddziaływań między atomami. Dla gazów i cieczy oddziaływanie średnie $\langle P \rangle$ i ciśnienie p można będzie wyznaczyć na podstawie molekularnokinetycznej teorii gazów. Jeżeli zachowamy wymiar związany ze średnicą atomów (w klasycznej teorii molekularno-kinetycznej wymiar ten pomija się jako bardzo mały) oraz zachowamy moment pędu atomów (również pomijany), to w trakcie zderzenia atomów gazu lub cieczy ze sobą i ze ściankami naczynia, w którym się znajdują będziemy mogli opisać dodatkowo oddziaływania momen-

60

towe, obrót atomów oraz wektor oddziaływań momentowych sprzężony z ciśnieniem \mathbf{p} .

Jeżeli spełniony jest warunek:

$$\frac{\rho P}{kT} \ll 1 \tag{181}$$

cotangensy hiperboliczne we wzorze (180) rozwiniemy w szereg (jak poprzednio) i pozostawimy tylko dwa pierwsze wyrazy otrzymując:

$$\mathbf{m}_{h}^{\text{couple}} = \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{\rho^{2} P}{kT} \mathbf{p}$$
(182)

5.2. Wartość oczekiwana momentu pędu precesji

Przedstawimy wartość oczekiwaną momentu pędu atomu k w objętości dV w kierunku prostopadłym do oddziaływania między atomami (moment pędu precesji) wg wzoru:

$$\left\langle J_{k}^{\text{couple}} \right\rangle = \sum_{-J}^{J} \Pi J_{k}^{\text{couple}} = \hbar \frac{\sum_{-J}^{J} \text{mech}_{J} \exp\left[\frac{U(\text{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[\frac{U(\text{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]} = \hbar J B_{J} \qquad (183)$$

Podobnie jak wcześniej, mnożąc wartość średnią składowej momentu magnetycznego $\langle J_k^{\text{couple}} \rangle$ przez liczbę wszystkich atomów *N* w objętości *dV*, otrzymamy makroskopowy współczynnik polaryzacji mechanicznej w objętości *dV*:

$$\mathfrak{T}_{V}^{\text{couple}} = N \left\langle J_{k}^{\text{couple}} \right\rangle \tag{184}$$

Uwzględniając współczynnik koncentracji atomów N = N/dV, wektor $\mathfrak{T}^{\text{couple}}$ będzie odnosił się do jednostki objętości. Ostatecznie wzór (184) zapiszemy w postaci:

$$\mathfrak{J}^{\text{couple}} = \mathrm{N}\hbar J \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2} \frac{\omega_z^{\text{couple}} \hbar}{kT} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{\omega_z^{\text{couple}} \hbar}{2kT} \right) \right]$$
(185)

Rozwijając jak poprzednio we wzorze (185) cotangensy hiperboliczne w szereg i zostawiając dwa pierwsze wyrazy, otrzymamy:

$$\mathfrak{I}^{\text{couple}} = N\hbar^2 \omega^{\text{couple}} \frac{J(J+1)}{3kT}$$
(186)

Dla niskich temperatur i silnych oddziaływań zapiszemy:

$$\mathfrak{J}^{\text{couple}} = \mathbf{N}\hbar \mathbf{J} \tag{187}$$

5.3. Wartość oczekiwana kierunku precesji

Zapiszemy wartość oczekiwaną cosinusa kąta opisującego wyróżniony kierunek wokół atomu dla zbioru atomów opisanych mechaniczną liczbą kwantową $mech_{J} = -J, -J+1, ..., 0, ..., J-1, J$ w postaci:

$$\left\langle \cos \varphi^{\text{couple}} \right\rangle = \left\langle \frac{\text{mech}_{J_z}}{\sqrt{J(J+1)}} \right\rangle = \sum_{\text{mech}_{J_z}=-J}^{\text{mech}_{J_z}=-J} \frac{\text{mech}_{J_z}}{\sqrt{J(J+1)}} \Pi(\text{mech}_{J_z}) = \\ = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} \frac{\sum_{-J}^{J} \text{mech}_{J_z} \exp\left[\frac{U(\text{mech}_{J_z})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[\frac{E(\text{mech}_{J_z})}{kT}\right]}$$
(188)

Wykonując działania jak poprzednio, (156)–(160), otrzymujemy:

$$\left\langle \cos \varphi^{\text{couple}} \right\rangle = \frac{J}{\sqrt{J(J+1)}} \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2} \frac{\omega_z^{\text{couple}} \hbar}{kT} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{\omega_z^{\text{couple}} \hbar}{2kT} \right) \right] (189)$$

Wyróżniony kierunek precesji przedstawimy wzorem:

$$\varphi^{\text{couple}} = \arccos \frac{J}{\sqrt{J(J+1)}} \mathbf{B}_J \tag{190}$$

Wartość tego kąta zależy w sposób niejawny od oddziaływania siłowego poprzez wektor $\boldsymbol{\omega}_{z}^{\text{couple}}$ występujący w wyrażeniu B_j i warunek $\boldsymbol{\omega}^{\text{couple}} \boldsymbol{P} = 0.$

Dla
$$\frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{kT} \ll 1$$
 zapiszemy:
 $\left\langle \cos\varphi^{\text{couple}} \right\rangle = \sqrt{J(J+1)} \frac{\omega_z^{\text{couple}}\hbar}{3kT}$
(191)

Jeżeli dodatkowo rozpatrujemy tylko ruch spinowy elektronu, to otrzymamy:

$$\left\langle \cos \varphi^{\text{couple}} \right\rangle = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{\omega_z^{\text{couple}} \hbar}{kT}$$
 (192)

W bardzo niskich temperaturach i przy bardzo silnych oddziaływaniach pomiędzy atomami zapiszemy:

$$\left\langle \cos \varphi^{\text{couple}} \right\rangle = \frac{J}{\sqrt{J(J+1)}}$$
 (193)

Jeżeli dodatkowo oddziaływania momentowe będą tylko spinowe, to dla $S = \frac{1}{2}$ wyróżnione kierunki precesji wokół atomu wyniosą:

$$\varphi_{S}^{\text{couple}} = \begin{cases} 54, 7^{\circ} \\ 125, 3^{\circ} \end{cases}$$

6. Makroskopowy opis polaryzacji mechanicznej ośrodka Cosseratów

W skali makro w elementarnej objętość dV, w której znajduje się N atomów, zdefiniujemy makroskopowy wektor momentu pędu:

$$\mathfrak{T} = \frac{1}{dV} \sum_{1}^{N} \boldsymbol{J}_{k} \tag{194}$$

Gdy nie występuje zewnętrzne obciążenie układu atomów k = 1, 2, 3, ... N zawartych w objętości dV, wektory momentu pędu J_k zorientowane są w przestrzeni w sposób całkowicie nieuporządkowany i sumaryczny makroskopowy moment pędu będzie równy zero, $\mathfrak{T} = 0$ (rys. 25). W chwili przyłożenia obciążenia zewnętrznego na skutek precesji wektorów J_k makroskopowy wektor \mathfrak{T} ustawia się w kierunku prostopadłym do uśrednionego w objętości dV kierunku oddziaływania międzyatomowego, przyjmując wartość:

$$\mathfrak{T}^{\text{couple}} = \frac{1}{dV} \sum_{1}^{N} J_{k}^{\text{couple}}$$
(195)

Proces ten trwający w czasie T opiszemy wzorem:

$$\frac{d\mathfrak{S}}{dt} = \frac{\mathfrak{S}^{\text{couple}} - \mathfrak{S}}{T}$$
(196)

Równanie (196) przedstawimy w postaci:

$$\frac{d\mathfrak{I}}{\mathfrak{I}^{\text{couple}} - \mathfrak{I}} = \frac{t}{T}$$
(197)

Następnie scałkujemy obustronnie:

$$\int_{0}^{\mathfrak{r}^{\text{couple}}} \frac{d\mathfrak{I}_{V}}{\mathfrak{r}^{\text{couple}} - \mathfrak{r}} = \frac{1}{T} \int_{0}^{t} dt$$
(198)

otrzymując:

$$\ln \frac{\Im^{\text{couple}}}{\Im^{\text{couple}} - \Im} = \frac{t}{T}$$
(199)

Na podstawie (199) zapiszemy zależność makroskopowego momentu pędu od czasu:

$$\mathfrak{T}(t) = \mathfrak{T}^{\text{couple}}\left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right)$$
(200)

Oznacza to, że jeżeli w czasie t = 0 nienaprężony materiał Cosseratów poddamy obciążeniom mechanicznym, to w wyniku niesymetrycznej budowy atomów wystąpią oddziaływania momentowe, precesja atomów i polaryzacja mechaniczna charakteryzowana w skali makro obrotem w czasie makroskopowego momentu pędu \mathfrak{T} o kąt precesji φ^{couple} i zmianą wartości tego momentu od $\mathfrak{T} = 0$ do $\mathfrak{T}^{\text{couple}}$. Wiąże się to z obrotem elementarnej objętości materiału dV i pojawieniem się naprężeń momentowych. W trakcie tego procesu energia mechaniczna:

$$E(t) = -\boldsymbol{\omega}^{\text{couple}} \boldsymbol{\Im}(t) \tag{201}$$

będzie malała aż do momentu kiedy makroskopowy moment pędu \mathfrak{T} osiągnie wartość \mathfrak{T}^{couple} odpowiadającą nowemu stanowi równowagi.

Jeżeli uwzględnimy procesy relaksacyjne, to makroskopowe równanie ruchu zapiszemy w postaci:

$$\frac{d\mathfrak{S}}{dt} = d\mathfrak{M}_{\nu}^{\text{couple}} + \frac{\mathfrak{S}^{\text{couple}} - \mathfrak{S}}{T}$$
(202)



Rys. 25. Polaryzacja atomów w objętości dV pod działaniem obciążenia mechanicznego

7. Analogia do teorii niesymetrycznej sprężystości

W teorii sprężystości analizę przeprowadza się na elementach geometrycznych znacznie większych od rozmiarów atomu i przyjmuje się, że promień atomu jest równy zero. Nie jest więc możliwe wyjaśnienie zjawiska powstawania naprężeń momentowych, wg opisu przedstawionego w tej pracy, na gruncie teorii makroskopowej. Obserwujemy natomiast makroskopowy skutek atomowych oddziaływań momentowych w postaci mechanicznej polaryzacji ośrodka, obrotu φ^{couple} oraz naprężeń momentowych.

Wprowadzonemu hipotetycznie w teorii niesymetrycznej sprężystości wektorowi naprężenia momentowego **m** odpowiada wielkość $\mathbf{m}^{\text{couple}}$ – wyprowadzona w prezentowanej pracy na podstawie elektronowej budowy materii, zależności kwantowych i statystyki Boltzmanna oraz odniesiona do jednostki powierzchni. Możemy zapisać analogię pomiędzy tymi dwoma wielkościami:

$$\mathbf{m} \equiv \mathbf{m}^{\text{couple}} \tag{203}$$

gdzie:

$$\mathbf{m}^{\text{couple}} = \mathbf{N}'\hbar \,\mathbf{\Omega} \mathbf{J}\mathbf{B}$$

Dla ciała obciążonego mechanicznie, pozostającego w równowadze, przedstawimy momenty występujące w obszarze V' ograniczonym powierzchnią A' (rys. 1):

$$\boldsymbol{M}^{\hat{\boldsymbol{\omega}}} = \int_{A'} (\boldsymbol{r} \times \mathbf{p}) dA$$
(204)

$$\boldsymbol{M}^{\text{couple}} = \int_{A'} d\boldsymbol{M}^{\text{couple}} = \int_{A'} \mathbf{m}^{\text{couple}} dA$$
(205)

$$\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{X}} = \int_{\boldsymbol{V}'} (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{X}) d\boldsymbol{V}$$
(206)

$$\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Y}} = \int_{\boldsymbol{V}'} \boldsymbol{Y} d\boldsymbol{V} \tag{207}$$

gdzie:

$$M^{\omega}$$
 – moment powiązany z wektorem naprężenia siłowego

M^{couple} – moment wynikający z budowy niesymetrycznej atomów, kwantowego opisu oddziaływań momentowych oraz statystyki Boltzmana (6), (14), (100), (162), (164),

 M_{X} – moment sił masowych,

- M_{Y}^{Λ} moment masowy,
 - promień wodzący liczony od początku układu współrzędnych,
- X, Y siła i moment masowy jednostki objętości.

Na podstawie (204)–(207) zapiszemy równanie równowagi momentów: $\int_{A'} (\mathbf{r} \times \mathbf{p} + \mathbf{m}^{\text{couple}}) dA + \int_{V'} (\mathbf{r} \times \mathbf{X} + \mathbf{Y}) dV = 0 \text{ i razem z równaniem równowagi sił:}$

 $\int_{A'} \mathbf{p} dA + \int_{V'} \mathbf{X} dV = 0$, po przekształceniach matematycznych (twierdzenie Ostrograd-

skiego-Gausa o dywergencji) otrzymamy warunek równowagi wewnętrznej dla sił: $\sigma_{ji,j} + X_i = 0$, oraz dla momentów: $\epsilon_{ijk} \sigma_{jk} + \mu_{ji,j} + Y_i = 0$, gdzie ϵ_{ijk} to alternator Levi--Civita, z którego wynika, że tensor σ_{jk} jest niesymetryczny. Niesymetryczność tensora σ_{ik} znika dla $\mu_{ii} = 0$, $Y_i = 0$.

W prezentowanej pracy starano się wykazać, że wprowadzony w teorii niesymetrycznej sprężystości, bez podawania fizycznych podstaw, obrót φ elementarnej objętości *dV* materiału poddanego obciążeniom zewnętrznym ma swoje odniesienie w skali nano do kąta precesji orbit elektronowych a cosinus tego kąta w skali makroskopowej można opisać odwołując się do zależności kwantowych i statystyki Boltzmanna (190). W związku z tym zapiszemy analogię:

$$\boldsymbol{\varphi} \equiv \boldsymbol{\varphi}^{\text{couple}} \tag{208}$$

gdzie:

$$\varphi^{\text{couple}} = \arccos \frac{J}{\sqrt{J(J+1)}} \mathbf{B}_J$$

Na podstawie znajomości obrotu φ^{couple} wprowadza się niesymetryczny tensor odkształcenia: $\varepsilon_{ij} = u_{j,i} + \epsilon_{kij} \varphi_k^{\text{couple}}$, gdzie *u* to wektor przemieszczenia. Wprowadza się także tensor skrętno-giętny: $\vartheta_{ij} = \varphi_{j,i}^{\text{couple}}$. Jeżeli obrót jest wynikiem operacji matematycznej polegającej na rozdzieleniu tensora o składowych $u_{i,j}$ na część symetryczną $\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ i skośnie symetryczną $\widehat{\omega}_k = \frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i})$ (rys. 25), to mówimy o uproszczonej teorii w ośrodku pseudocontinuum Cosseratów. Część skośnie symetryczną $\widehat{\omega}_k$ nie można utożsamiać z obrotem φ^{couple} .

Znając makroskopową wielkość φ^{couple} , makroskopowy moment pędu pochodzący od obrotu o kąt φ^{couple} , można zapisać dla elementarnej objętości:

$$\mathfrak{J}^{\text{couple}} = I \dot{\mathbf{\phi}}^{\text{couple}} \tag{209}$$

gdzie:

I – moment bezwładności masy ciała (zbioru atomów) na jednostkę objętości. Zapiszemy moment pędu objętości V' w chwili t:

$$\boldsymbol{J} = \int_{V'} (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\dot{\boldsymbol{\mu}}}) dV + \int_{V'} I \dot{\boldsymbol{\phi}}^{\text{couple}} dV$$
(210)

gdzie:

ξ – gęstość materiału.

Wzór (210) zawiera składnik $\int_{V'} (r \times \xi \dot{u}) dV$ wynikający z ruchu objętości dV na promieniu r z prędkością \dot{u} oraz składnik $\int_{V'} I\dot{\varphi}^{couple} dV$ niezależny od tego ruchu, a wynikający z polaryzacji mechanicznej atomów wypełniających objętość dV, $\frac{d\mathfrak{S}}{dt} = \frac{\mathfrak{S}^{couple} - \mathfrak{S}}{T}$ i obrotu φ^{couple} . Dla tych dwóch składników zapiszemy równania ruchu Eulera:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V'} (\mathbf{r} \times \xi \dot{\mathbf{u}}) dV = \mathbf{M}^{\bar{\omega}} + \mathbf{M}_{X}$$
(211)

$$\frac{D}{Dt} \int_{V'} I \dot{\boldsymbol{\phi}}^{\text{couple}} dV = \boldsymbol{M}^{\text{couple}} + \boldsymbol{M}_{Y}$$
(212)

Łącząc (205) i (212), otrzymamy formułę:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V'} I\dot{\varphi}^{\text{couple}} dV = \int_{A'} \mathbf{m}^{\text{couple}} dA + \int_{V'} \mathbf{Y} dV$$
(213)

wiążącą pochodną czasową obrotu Cosseratów z wektorem naprężenia momentowego.

Dla całkowitego momentu pędu (210) zapiszemy równanie ruchu Eulera w postaci łącznej:

$$\boldsymbol{M} = \frac{D\boldsymbol{J}}{Dt} \tag{214}$$

gdzie:

$$\boldsymbol{M} = \int_{A'} (\boldsymbol{r} \times \mathbf{p} + \mathbf{m}^{\text{couple}}) dA + \int_{V'} (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{X} + \boldsymbol{Y}) dV$$

Dołączając prawo Newtona na zmianę pędu p_u objętości V' ciała w czasie, równą wypadkowej siły P przyłożonej do ciała: $\frac{D}{Dt}p_u = P$, co zapisuje się jako: $\frac{D}{Dt}\int_{V'}\xi\dot{u}_i dV = \int_{A'}\sigma_{ji} dA + \int_{V'}X_i dV$, po przekształceniach matematycznych (twierdzenie Ostrogradskiego-Gausa o dywergencji) otrzymuje się równania ruchu: $\epsilon_{ijk} \sigma_{jk} + \mu_{ji,j} + Y_i = I\ddot{\varphi}_i^{couple}, \sigma_{ji,j} + X_i = \xi\ddot{u}_i$. Do równań ruchu dołącza się warunki brzegowe i poczatkowe.

W podsumowaniu (rys. 26) przedstawiamy jeszcze raz deformację układu atomów wywołaną oddziaływaniami momentowymi w zestawieniu z odkształceniami opisywanymi przez teorię sprężystości.



Rys. 26. Analogia pomiędzy opisem odkształcenia układu atomów k = 1, 2, 3, 4 w skali nano a opisem odkształcenia elementarnego prostopadłościanu na poziomie continuum. A1. Obrót układu atomów utożsamiany z kątem precesji atomu k. A2. Obrót układu atomów mierzony jako przyrost kąta precesji atomów składowych. B1. Obrót opisywany przez część skośnie symetryczną tensora $u_{i,j}$, $\hat{\omega} = \frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i})$. B2. Odkształcenie postaciowe jako część symetryczna tensora $u_{i,j}$, $\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$

Analogia przedstawiona pomiędzy opisem dyskretnej natury materii w postaci zbioru atomów a kontynualną teorią niesymetrycznej sprężystości może być pomocna w ocenie wpływu parametrów skali atomowej na wielkości inżynierskie skali makroskopowej.

8. Makromagnetyzacja ośrodka Cosseratów

Posługując się wzorem (137) oraz (154), dla zbioru atomów k=1,2,3,...N zajmujących objętość dV, policzymy wartość oczekiwaną składowej momentu pędu w wyróżnionym kierunku [33]:

$$\left\langle p_{m_{J_{z}}}^{\text{couple}} \right\rangle = \sum_{-J}^{J} \Pi(\text{mech}_{J_{z}}) (p_{m_{J_{z}}}^{\text{couple}})_{k} = \mu_{B} g_{V} \frac{\sum_{-J}^{J} \text{mech}_{J_{z}} \exp\left[-\frac{U(\text{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]}{\sum_{-J}^{J} \exp\left[-\frac{U(\text{mech}_{J_{z}})}{kT}\right]} \quad (215)$$

gdzie g_V to stała rozszczepienia spektroskopowego, która ze względu na definicję objętości dV, podaną w podrozdziale 5.1, będzie w przybliżeniu jednakowa dla całego zbioru atomów $k = 1, 2, 3, ..., N, g_k \sim g_V$. Z tego samego powodu zapiszemy dla pola magnetycznego $(B_z^{couple})_k \sim B^{couple}$.

Stosując wzór (125) oraz wykonując operacje matematyczne jak w rozdziale 5, otrzymujemy:

$$\left\langle p_{m_{J_{z}}}^{\text{couple}} \right\rangle = \mu_{B} g_{V} J \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{2J+1}{2} \frac{\mu_{B} g_{V} B^{\text{couple}}}{kT} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh} \left(\frac{\mu_{B} g_{V} B^{\text{couple}}}{2kT} \right) \right] (216)$$

We wzorze (216) wyrażenie w nawiasie kwadratowym jest funkcją Brillouina:

$$B_{\text{Brillouina}} = \left[\frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh}\left(\frac{2J+1}{2}\frac{\mu_B g_V B^{\text{couple}}}{kT}\right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh}\left(\frac{\mu_B g_V B^{\text{couple}}}{2kT}\right)\right] (217)$$

Mnożąc otrzymaną wartość przez liczbę wszystkich atomów N w objętości dV, otrzymamy wzór na magnetyzację objętości dV:

$$dG_{V}^{\text{couple}} = N \left\langle p_{m_{J_{z}}}^{\text{couple}} \right\rangle = N \mu_{B} g_{V} J B_{\text{Brillouina}}$$
(218)

Ponieważ obowiązuje zależność makroskopowa:

$$dG_V^{\text{couple}} = \chi dH_V^{\text{couple}}$$
(219)

gdzie:

 χ – podatność magnetyczna, dH_V^{couple} – natężenie pola magnetycznego w objętości dV oraz ze względu na zależność:

$$dB_V^{\text{couple}} = \kappa \kappa_o dH_V^{\text{couple}} \tag{220}$$

gdzie κ , κ_o jest odpowiednio przenikalnością magnetyczną ośrodka Cosseratów i próżni, łącząc (219) i (220) otrzymamy makroskopową wartość indukcji pola magnetycznego wywołanego mechaniczną zmianą odległości między atomami:

$$dB_V^{\text{couple}} = \frac{\kappa \kappa_o}{\chi} dG_V^{\text{couple}}$$
(221)

Jeżeli wprowadzimy współczynnik koncentracji atomów N = N/dV, podstawimy go do wzoru (218) w miejsce N, to opiszemy magnetyzację dG^{couple} , natężenie pola magnetycznego dH^{couple} i indukcję magnetyczną dB^{couple} w odniesieniu do jednostki objętości:

$$dG^{\text{couple}} = \mathrm{N}\mu_B g_V J B_{\text{Brillouina}}$$
(222)

$$dH^{\text{couple}} = N \frac{\mu_B g_V}{\chi} J B_{\text{Brillouina}}$$
(223)

$$dB^{\text{couple}} = N \frac{\kappa \kappa_o \mu_B g_V}{\chi} J B_{\text{Brillouina}}$$
(224)

Namagnesowanie ośrodka Cosseratów od obciążeń mechanicznych możemy opisać w temperaturach pokojowych wg prawa Curie przy spełnionym warunku:

$$\frac{\mu_B dB^{\text{couple}}}{kT} \ll 1 \tag{225}$$

Rozwijając we wzorze (217) cotangens hiperboliczny w szereg i zostawiając dwa pierwsze wyrazy, otrzymamy w odniesieniu do jednostki objętości:

$$dG^{\text{couple}} = \frac{CdB^{\text{couple}}}{\kappa\kappa_o T}$$
(226)

gdzie:

$$C = N\kappa\kappa_o g_V^2 \mu_B^2 \frac{J(J+1)}{3k} - \text{stała Curie.}$$

Oddziaływanie momentowe dotyczy atomów, które posiadają moment pędu i zarazem moment magnetyczny. Ośrodek Cosseratów ma więc własności paramagnetyczne. Analogia mechaniczna zjawisk paramagnetycznych została zasugerowana przez Einsteina który stwierdził, że praca nad technicznymi raportami na temat kompasów żyroskopowych doprowadziła go do wyjaśnienia natury paramagnetyzmu. Należy przypuszczać że w diamagnetykach naprężenia momentowe będą indukować momenty magnetyczne a w ferromagnetykach momenty magnetyczne wywo-
łane precesją będą uzupełniać magnetyzację wywołaną siłami wymiany. Pierwsze doświadczenie z dziedziny zjawisk magnetomechanicznych w ferromagnetykach przeprowadzili Einstein i de Haas oraz Barnett. Doświadczenia wykonane w skali makro posłużyły do wyznaczenia wielkości w skali nano, tzn. stosunku momentu magnetycznego atomu do jego momentu pędu nazywanego stosunkiem magnetome-

chanicznym
$$\gamma = \frac{p_m}{J} = -g \frac{e}{2m}$$
. Dla ruchu orbitalnego elektronu $\gamma = \frac{p_{m_L}}{L} = -g_L \frac{e}{2m_e}$,

 $g_L = 1$, natomiast dla ruchu spinowego $\gamma = \frac{p_{m_s}}{S} = -g_s \frac{e}{2m_e}$, $g_s = 2$. Wynik otrzymany

w doświadczeniach Einsteina, de Haasa i Barnetta dowodzi, że magnetyczne własności ferromagnetyków wywołane są przez ruch spinowy elektronów.

9. Ośrodek Cosseratów w spektrometrze EPR

Próbkę o objętości *V* o własnościach paramagnetycznych z wbudowanymi naprężeniami mechanicznymi umieszczamy we wnęce rezonansowej spektrometru EPR. Próbka jest pod działaniem pola magnetycznego spektrometru [32]: $\mathbf{B}^{\text{EPR}} = B_1(\vec{i} \cos \omega t - \vec{j} \sin \omega t) + B_o \vec{k}$, gdzie B_1 jest zmiennym poprzecznym polem magnetycznym obracającym się w płaszczyźnie poziomej (*x*, *y*) z częstością ω , B_o jest stałym polem magnetycznym działającym w kierunku pionowym *z* (rys. 27), \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} to jednostkowe wektory równoległe do osi *x*, *y*, *z*, natomiast *t* – czas.



Rys. 27. Graficzna interpretacja rezonansu magnetycznego EPR atomu *k* obciążonego mechanicznie

Działanie pola magnetycznego w spektrometrze EPR jest opisane przez równania Blocha [32]. Uwzględniając pole magnetyczne próbki $\boldsymbol{B}^{\text{couple}} = \int_{V} d\boldsymbol{B}^{\text{couple}}$ pochodzą-

ce od mechanicznego obciążenia, równania Blocha zapiszemy w formie:

$$\frac{d\boldsymbol{G}_x}{dt} = \gamma [\boldsymbol{G} \times (\boldsymbol{B}^{\text{couple}} + \boldsymbol{B}^{\text{EPR}})_x + \frac{\boldsymbol{G}_x^{\text{couple}} - \boldsymbol{G}_x}{T_x}$$
(227)

$$\frac{d\boldsymbol{G}_{y}}{dt} = \gamma [\boldsymbol{G} \times (\boldsymbol{B}^{\text{couple}} + \boldsymbol{B}^{\text{EPR}})]_{y} + \frac{G_{y}^{\text{couple}} - G_{y}}{T_{y}}$$
(228)

$$\frac{d\boldsymbol{G}_{z}}{dt} = \gamma [\boldsymbol{G} \times (\boldsymbol{B}^{\text{couple}} + \boldsymbol{B}^{\text{EPR}})]_{z} + \frac{G_{z}^{\text{couple}} + G_{o} - G_{z}}{T_{z}}$$
(229)

gdzie:

$$G = \int_{V} dG,$$

$$T_{x}, T_{y}, T_{z} - \text{czasy relaksacji oddziaływań pomiędzy polem magnetycznym}$$

$$B^{\text{EPR}} \text{ i naprężoną siatką krystaliczną wzdłuż osi } x, y, z,$$

$$G_o$$
 – składowa z magnetyzacji pochodząca od pola magnetyczne-
go B_o .

Po wykonaniu przekształceń i podstawieniu $\omega_o = \gamma B_o$, $\omega_1 = \gamma B_1$ równania (227)– -(229) zapiszemy w postaci:

$$\frac{dG_x}{dt} = (\omega_z^{\text{couple}} + \omega_o)G_y - (\omega_y^{\text{couple}} - \omega_1 \sin \omega t)G_z + \frac{G_x^{\text{couple}} - G_x}{T_x}$$
(230)

$$\frac{dG_y}{dt} = -(\omega_z^{\text{couple}} + \omega_o)G_x + (\omega_x^{\text{couple}} + \omega_1 \cos \omega t)G_z + \frac{G_y^{\text{couple}} - G_y}{T_y}$$
(231)

$$\frac{dG_z}{dt} = (\omega_y^{\text{couple}} - \omega_1 \sin \omega t)G_x - (\omega_x^{\text{couple}} + \omega_1 \cos \omega t)G_y + \frac{G_z^{\text{couple}} + G_o - G_z}{T_z}$$
(232)

9.1. Stan hydrostatyczny

Stan hydrostatyczny będzie realizowany w wyniku obciążenia hydrostatycznego ośrodka o własnościach izotropowych lub kryształu o symetrii kubicznej. W innym przypadku obciążenie hydrostatyczne spowoduje powstanie złożonego stanu naprężenia.

Stan hydrostatyczny ośrodka Cosseratów opiszemy wg zależności:

$$B_x^{\text{couple}} = B_y^{\text{couple}} = B_z^{\text{couple}} = B^{\text{couple}}$$
(233)

$$G_x^{\text{couple}} = G_y^{\text{couple}} = G_z^{\text{couple}} = G^{\text{couple}}$$
(234)

$$\omega_x^{\text{couple}} = \omega_y^{\text{couple}} = \omega_z^{\text{couple}} = \omega^{\text{couple}} = \gamma B^{\text{couple}}$$
(235)

75

Jeżeli pola B_1 , B^{couple} są niewielkie w porównaniu z polem B_o , to podstawiając $T_z = T_1$, $T_x = T_y = T_2$, zapiszemy rozwiązanie układu równań (230)–(232):

$$G_{x} = m_{\text{EPR}} \cos(\omega t + \phi) + G^{\text{couple}}$$
(236)

$$G_{y} = -m_{\rm EPR} \sin(\omega t + \phi) + G^{\rm couple}$$
(237)

$$G_z = G_o + G^{\text{couple}} \tag{238}$$

gdzie:

$$m_{\rm EPR} = \frac{\left[G_o(\omega_1 + \omega^{\rm couple}) - G^{\rm couple}(\omega_o - \omega_1)\right]T_2}{\sqrt{1 + \left[(\omega_o + \omega^{\rm couple}) - \omega\right]^2 T_2^2}}$$
(239)

$$tg\phi = \frac{1}{\left[\left(\omega_o + \omega^{\text{couple}}\right) - \omega\right]T_2}$$
(240)

 m_{EPR} – amplituda poprzecznej magnetyzacji, ϕ – kąt azymutalny pomiędzy **G** i **B**.

9.2. Moc absorpcji

Szybkość absorpcji energii (moc absorpcji) w jednostce objętości przez układ atomów ośrodka Cosseratów we wnęce spektrometru EPR będziemy opisywać następującym wzorem [32]:

$$W = \boldsymbol{B}^{\text{EPR}} \frac{d\boldsymbol{G}}{dt}$$
(241)

Podstawiając składowe pola B^{EPR} oraz składowe (236)–(238) wektora G do wzoru (241), otrzymamy:

$$W = \frac{\omega B_1 T_2 \left[G_o(\omega_1 + \omega^{\text{couple}}) - G^{\text{couple}}(\omega_o - \omega_1) \right]}{1 + \left[(\omega_o + \omega^{\text{couple}}) - \omega \right]^2 T_2^2}$$
(242)

Na podstawie wzoru (240) przewidujemy, że naprężenia momentowe spowodują zmianę mocy absorpcji poddanej obciążeniu mechanicznemu próbki umieszczonej w spektrometrze EPR względem próbki bez takiego obciążenia, kiedy $\omega^{\text{couple}} = 0$, $G^{\text{couple}} = 0$. Warunek rezonansu EPR zapiszemy raz dla próbki bez naprężeń mechanicznych [32]:

$$\hbar\omega = g\mu_B B_o \tag{243}$$

oraz dla próbki obciążonej mechanicznie:

$$\hbar(\omega + \omega^{\text{couple}}) = g^{\text{load}} \mu_B(B_o + B^{\text{couple}})$$
(244)

Jeżeli w spektrometrze EPR dla dobranej wartości B_o zmierzymy ω , g oraz $(\omega + \omega^{\text{couple}})$, g^{load} , $(B_o + B^{\text{couple}})$, to możemy wyznaczyć poszukiwane parametry fizyczne ośrodka Cosseratów ω^{couple} , B^{couple} oraz zmianę czynnika rozszczepienia spektroskopowego od wartości g do warości g^{load} .

Sposób obsadzenia stanów energetycznych przez atomy zaburzone w objętości V opisuje rozkład Boltzmanna:

$$\left(\frac{N_{\text{mech}_{J+1}}}{N_{\text{mech}_{J}}}\right)_{V} = \exp\left(-\frac{U_{\text{mech}_{J+1}} - U_{\text{mech}_{J}}}{kT}\right)_{V}$$
(245)

gdzie:

 $N_{\text{mech}_{J+1}}$, $N_{\text{mech}_{J}}$ – liczba atomów obsadzających poziomy mech_{J+1} , mech_{J} , odpowiednio.

Wobec powyższego prędkość kątową precesji oraz pole magnetyczne pochodzące od naprężeń momentowych należy traktować jako wielkości pochodzące od całych populacji atomów:

$$\omega_{V}^{\text{couple}} = -\frac{kT}{\hbar} \ln \left(\frac{N_{\text{mech}_{J+1}}}{N_{\text{mech}_{J}}} \right)_{V}$$
(246)

$$B_{V}^{\text{couple}} = -\frac{kT}{g^{\text{load}}\mu_{B}} \ln \left(\frac{N_{\text{mech}_{J+1}}}{N_{\text{mech}_{J}}}\right)_{V}$$
(247)

10. Modelowanie ośrodka Cosseratów z obrotową (chiralną) dwójłomnością wymuszoną

Ze względu na rozszczepienie stanu energetycznego atomu w polu oddziaływań mechanicznych (patrz rozdział 4) oraz rozszczepione linie widmowe opisane wzorami: (109), (110) oraz (128)–(130) należy spodziewać się rozdzielenia spolaryzowanej liniowo fali światła przechodzącego przez ośrodek Cosseratów na dwie fale spolaryzowane kołowo, jedną prawoskrętnie i drugą lewoskrętnie. Ponieważ na drodze geometrycznej tych dwóch spolaryzowanych kołowo fal występują naprężenia momentowe, należy się spodziewać, że fale te będą przechodzić przez ośrodek Cosseratów z różnymi prędkościami i po wyjściu z ośrodka wystąpi na skutek interferencji skręcenie płaszczyzny polaryzacji światła proporcjonalne do naprężeń momentowych [64].

10.1. Uogólniony tensor przenikalności dielektrycznej

Oprócz tensora przenikalności dielektrycznej κ_{ij} w równaniu materiałowym dla ośrodków elastooptycznych Cosseratów wystąpi niezależny tensor skręcenia optycznego a_{ij} . Jeżeli tensor przenikalności dielektrycznej jest związany z wektorem przemieszczenia *u* i z naprężeniem siłowym σ_{ij} , to tensor skręcenia powiążemy z wektorem obrotu φ i z naprężeniem momentowym μ_{ij} . Uogólniony tensor przenikalności dielektrycznej zapiszemy w postaci [52]:

$$K_{ij} = \kappa_{ij} - i \in_{ijk} a_{kl} s_l \tag{248}$$

gdzie:

 $i = \sqrt{-1}$,

 s_i – wymiar wektora jednostkowego s_i prostopadłego do frontu fali.

10.2. Równania materiałowe

Zapiszemy podstawowe równanie obrotowej (chiralnej) dwójłomności wymuszonej [52]:

$$\boldsymbol{D}_{k} = \kappa_{o} \kappa_{kl} \boldsymbol{E}_{l} + i \kappa_{o} \left(\boldsymbol{a}_{kl} \boldsymbol{s}_{l} \times \boldsymbol{E} \right)_{k}$$
(249)

79

gdzie:

 D_{ν} – wektor indukcji elektrycznej,

 E_i – wektor natężenia pola elektrycznego,

κ – przenikalność dielektryczna próżni.

Anizotropia optyczna wywołana stanem naprężenia siłowego [1] opisywana jest wzorem:

$$\kappa_{kl} = \kappa \delta_{kl} + C_1^{\sigma} \sigma_{kl} + C_2^{\sigma} \sum \sigma_{il} \delta_{kl}$$
(250)

gdzie:

 $C_1^{\sigma}, C_2^{\sigma}$ – stałe optyczne, κ – przenikalność dielektryczna w ośrodku bez naprężeń,

 δ_{ii} – symbol Kroneckera.

Wobec braku zależności pomiędzy tensorem skręcenia a_{ii} a tensorem naprężenia momentowego μ_{ii} zaproponowano wzór [56]:

$$a_{kl} = a\delta_{kl} + C_1^{\mu}\mu_{kl} + C_2^{\mu}\sum \mu_{ii}\delta_{kl}$$
(251)

gdzie:

- parametr skręcenia naturalnego (przy braku naprężeń), а

 C_1^{μ}, C_2^{μ} – stałe optyczne.

Uogólniony tensor przenikalności dielektrycznej κ_{ii} razem z wektorem obrotu θ_{k} definiowanym jako:

$$\boldsymbol{\theta}_{k} = \boldsymbol{a}_{kl} \, \boldsymbol{s}_{l} \tag{252}$$

w układzie (x, y, z), zapiszemy w formie:

$$K_{i,j} = \begin{bmatrix} \kappa_x & \kappa_{xy} - i\theta_z & \kappa_{xz} + i\theta_y \\ \kappa_{yx} + i\theta_z & \kappa_y & \kappa_{yz} - i\theta_x \\ \kappa_{zx} - i\theta_y & \kappa_{zy} + i\theta_x & \kappa_z \end{bmatrix}$$
(253)

10.3. Fala światła w ośrodku Cosseratów

Grupując równania Maxwella z równaniami materiałowymi zapisanymi w pierwszym przybliżeniu [52], otrzymujemy:

$$\begin{array}{l} \operatorname{rot}\boldsymbol{H} - \dot{\boldsymbol{D}} = 0 \\ \boldsymbol{D} = \kappa \kappa_o \boldsymbol{E} \end{array} \right\} \quad \operatorname{rot} \dot{\boldsymbol{H}} - \kappa \kappa_o \ddot{\boldsymbol{E}} = 0 \tag{254}$$

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} + \dot{\boldsymbol{B}} = 0 \\ \boldsymbol{B} = \chi \chi_o \boldsymbol{H} \end{cases} \operatorname{rotrot} \boldsymbol{E} + \chi \chi_o \operatorname{rot} \dot{\boldsymbol{H}} = 0$$
(255)

gdzie:

H – wektor natężenia pola magnetycznego,

B – wektor indukcji magnetycznej.

Na podstawie tożsamości:

$$rotrot \boldsymbol{E} = \operatorname{graddiv} \boldsymbol{E} - \nabla^2 \boldsymbol{E}$$
(256)

otrzymujemy równanie falowe:

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \chi \chi_o \kappa \kappa_o \ddot{\boldsymbol{E}} = 0 \tag{257}$$

którego rozwiązanie:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_o \exp\left[i\omega\left(\frac{\boldsymbol{rs}}{c_n}\right)\right]$$
(258)

gdzie:

uzic. ω – prędkość kątowa, t – czas, r – promień wodzący, $c_n = \frac{1}{\sqrt{\kappa\kappa_o \chi \chi_o}}$ – prędkość fazowa fali w ośrodku o współczynniku załamania n, χ_o – przenikalność magnetyczna próżni, χ – przenikalność magnetyczna ośrodka elastooptycznego,

służy do zapisania zależności:

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = \frac{i\omega}{c_n} (\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{s}) \tag{259}$$

Podobnie otrzymujemy:

$$\operatorname{rot}\boldsymbol{H} = \frac{i\omega}{c_n} (\boldsymbol{H} \times \boldsymbol{s}) \tag{260}$$

Grupując następnie równania:

$$\boldsymbol{D} = \kappa \kappa_o \boldsymbol{E}$$
$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_o \exp\left[i\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{rs}}{c_n}\right)\right] \quad \dot{\boldsymbol{D}} = i\omega \boldsymbol{D}$$
(261)

oraz

$$\boldsymbol{B} = \chi \chi_o \boldsymbol{H}$$
$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_o \exp\left[i\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{rs}}{c_n}\right)\right] \quad \dot{\boldsymbol{B}} = i\omega\boldsymbol{B}$$
(262)

i łącząc z zapisanymi powyżej, otrzymujemy formuły:

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{H} - \dot{\boldsymbol{D}} = 0 \to \boldsymbol{H} \times \boldsymbol{s} = c_n \boldsymbol{D}$$
(263)

$$\operatorname{rot}\boldsymbol{E} + \dot{\boldsymbol{B}} = 0 \xrightarrow{\boldsymbol{B} = \chi\chi_o \boldsymbol{H}} \boldsymbol{s} \times \boldsymbol{H} = c_n \chi\chi_o \boldsymbol{H}$$
(264)

które zapiszemy łącznie w postaci:

$$\sqrt{\frac{\kappa\kappa_o}{\chi\chi_o}} \left[(\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{E}) \times \boldsymbol{s} \right] = c_n \boldsymbol{D}$$
(265)

Podstawiając zależność $n = \sqrt{\chi \kappa}$, przy warunku, że $\chi = 1$ dla ośrodka elastooptycznego, otrzymujemy:

$$\boldsymbol{D} = -\kappa_o n^2 \left[(\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{s}) \times \boldsymbol{s} \right]$$
(266)

Równanie (266) zapiszemy w formie:

$$\boldsymbol{D} = \kappa_{o} n^{2} \left[\boldsymbol{E} - \boldsymbol{s} \left(\boldsymbol{E} \boldsymbol{s} \right) \right]$$
(267)

Porównując składowe wzorów (249), (267), zapiszemy układ równań:

$$E_{x}\left[\kappa_{x} - (1 - s_{x}^{2})n^{2}\right] + E_{y}(n^{2}s_{x}s_{y} + \kappa_{xy} - i\theta_{z}) + E_{z}(n^{2}s_{x}s_{z} + \kappa_{xz} + i\theta_{y}) = 0$$

$$E_{y}\left[\kappa_{y} - (1 - s_{y}^{2})n^{2}\right] + E_{z}(n^{2}s_{y}s_{z} + \kappa_{yz} - i\theta_{x}) + E_{x}(n^{2}s_{y}s_{x} + \kappa_{yx} + i\theta_{z}) = 0 \quad (268)$$

$$E_{z}\left[\kappa_{z} - (1 - s_{z}^{2})n^{2}\right] + E_{x}(n^{2}s_{z}s_{x} + \kappa_{zx} - i\theta_{y}) + E_{y}(n^{2}s_{z}s_{y} + \kappa_{zy} + i\theta_{x}) = 0$$

do wyznaczania zależności opisujących falę elektromagnetyczną w ośrodku nieliniowym. Gdy światło przechodzi przez ośrodek w kierunku x (rys. 28), wektory jednostkowe przyjmują wartości:

$$s_x = 1, \quad s_y = s_z = 0$$
 (269)

i reprezentację macierzową tensora (253) dla tego kierunku zapiszemy w postaci uproszczonej:

$$T_{K}^{(x)} = \begin{bmatrix} \kappa_{2}^{(x)} & \kappa_{23}^{(x)} - i\theta_{x} \\ \kappa_{32}^{(x)} + i\theta_{x} & \kappa_{3}^{(x)} \end{bmatrix}$$
(270)

gdzie $(1^{(x)} = x, 2^{(x)}, 3^{(x)})$ to układ kierunków quasi-głównych (optycznie czynnych) związany z kierunkiem *x* przebiegu światła. Pozostałe składowe tensora (253) nie mają wpływu na falę światła.

Zapiszemy układ równań (268) dla kierunków $(1^{(x)}=x, 2^{(x)}, 3^{(x)})$ i podstawiając (269), otrzymamy:

$$E_{2}^{(x)}\left(\kappa_{2}^{(x)}-(n^{(x)})^{2}\right)+E_{3}^{(x)}\left(\kappa_{23}^{(x)}-i\theta_{x}\right)=0$$

$$E_{2}^{(x)}\left(\kappa_{32}^{(x)}+i\theta_{x}\right)+E_{3}^{(x)}\left(\kappa_{3}^{(x)}-(n^{(x)})^{2}\right)=0$$
(271)

Z warunków rozwiązania niezerowego:

$$\begin{vmatrix} \kappa_{2}^{(x)} - (n^{(x)})^{2} & \kappa_{23}^{(x)} - i\theta_{x} \\ \kappa_{32}^{(x)} + i\theta_{x} & \kappa_{3}^{(x)} - (n^{(x)})^{2} \end{vmatrix} = 0$$
(272)

wyznaczamy pierwiastki układu (271) w postaci współczynników załamania światła:

$$(n^{(x)})_{r}^{2} = \frac{\kappa_{2}^{(x)} + \kappa_{3}^{(x)}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}$$

$$(n^{(x)})_{l}^{2} = \frac{\kappa_{2}^{(x)} + \kappa_{3}^{(x)}}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}$$
(273)

Dla pierwiastków (273) równania (271) mają nieskończenie wiele rozwiązań powiązanych zależnościami:

$$\frac{E_3^{(x)}}{E_2^{(x)}} = \frac{(n_r^{(x)})^2 - \kappa_2^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_x}$$
(274)

$$\frac{E_3^{(x)}}{E_2^{(x)}} = \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x}{(n_r^{(x)})^2 - \kappa_3^{(x)}}$$
(275)

$$\frac{E_3^{(x)}}{E_2^{(x)}} = \frac{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_2^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_x}$$
(276)

$$\frac{E_3^{(x)}}{E_2^{(x)}} = \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x}{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_3^{(x)}}$$
(277)

Oznaczając $E_2^{(x)} = E_o$ na podstawie (274)–(277), otrzymujemy cztery fale światła:

$$E_{1} = \left[0, E_{o}, \frac{(n_{r}^{(x)})^{2} - \kappa_{2}^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_{x}} E_{o}\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_{r}^{(x)})\right]$$
(278)

$$E_{\rm II} = \left[0, E_o, \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x}{(n_r^{(x)})^2 - \kappa_3^{(x)}} E_o\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_r^{(x)})\right]$$
(279)

$$E_{\rm III} = \left[0, E_o, \frac{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_2^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_x} E_o\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_l^{(x)})\right]$$
(280)

$$E_{\rm IV} = \left[0, E_o, \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x}{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_3^{(x)}} E_o\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_l^{(x)})\right]$$
(281)

Dodając fale o tych samych fazach, otrzymujemy:

$$\mathbf{E}_{1} = \left[0, 2E_{o}, \left(\frac{(n_{r}^{(x)})^{2} - \kappa_{2}^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_{x}} + \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_{x}}{(n_{r}^{(x)})^{2} - \kappa_{3}^{(x)}}\right)E_{o}\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_{r}^{(x)})\right]$$
(282)

$$\mathbf{E}_{\mathrm{II}} = \left[0, 2E_o, \left(\frac{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_2^{(x)}}{\kappa_{23}^{(x)} - i\theta_x} + \frac{\kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x}{(n_l^{(x)})^2 - \kappa_3^{(x)}}\right) E_o\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_l^{(x)})\right] \quad (283)$$

gdzie:

$$\psi_r^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta_r^{(x)} \tag{284}$$

$$\Psi_l^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta_l^{(x)} \tag{285}$$

są fazami związanymi ze współczynnikami załamania $n_r^{(x)}$, $n_l^{(x)}$ fal E_I i E_{II} , λ jest długością fali, natomiast wielkości $\Delta_r^{(x)}$, $\Delta_l^{(x)}$ są drogami optycznymi fal E_I i E_{II} .

Podstawiając wzory (273) na $n_r^{(x)}$ i $n_l^{(x)}$ oraz wzór Eulera exp $[i (\omega t - \psi)] = \cos (\omega t - \psi) + i \sin (\omega t - \psi)$, porządkujemy i zapisujemy część rzeczywistą składowych fal światła:

$$E_{21} = E_o \cos(\omega t - \psi_r^{(x)})$$
 (286)

$$E_{31} = E_o A \cos(\omega t - \psi_r^{(x)} + \phi^{(x)})$$
(287)

$$E_{2\mathrm{II}} = E_o \cos(\omega t - \psi_l^{(x)}) \tag{288}$$

$$E_{3II} = E_o B \cos(\omega t - \psi_l^{(x)} + \phi^{(x)})$$
(289)

gdzie:

$$A = \sqrt{A_1^2 + A_2^2}$$
(290)

$$B = \sqrt{B_1^2 + B_2^2} \tag{291}$$

$$\phi^{(x)} = \arctan \frac{A_2}{A_1} = \arctan \frac{B_2}{B_1}$$
(292)

$$A_{1} = \frac{\left(\kappa_{3}^{(x)} - \kappa_{2}^{(x)} + \sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}\right) \left[\kappa_{23}^{(x)}(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}) + \kappa_{32}^{(x)}(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2})\right]}{2(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2})(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}$$
(293)

$$A_{2} = \frac{\left(\kappa_{3}^{(x)} - \kappa_{2}^{(x)} + \sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}\right) \left(2\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}\right)}{2\left(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2}\right) (\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}$$
(294)

$$B_{1} = \frac{\left(\kappa_{3}^{(x)} - \kappa_{2}^{(x)} - \sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}\right) \left[\kappa_{23}^{(x)}(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}) + \kappa_{32}^{(x)}(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2})\right]}{2(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2})(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}$$

(295)

$$B_{2} = \frac{\left(\kappa_{3}^{(x)} - \kappa_{2}^{(x)} - \sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}\right) \left(2\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}\right)}{2\left(\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2}\right) \left(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}\right)} \qquad (296)$$

$$\phi^{(x)} = \arctan\frac{\theta_{x}\left(2\theta_{x}^{2} + (\kappa_{23}^{(x)})^{2} + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)}\right)}{\theta_{x}^{2}(\kappa_{23}^{(x)} + \kappa_{32}^{(x)}) + 2(\kappa_{23}^{(x)})^{2}\kappa_{32}^{(x)}} \qquad (297)$$

Wybierając odpowiednie pary składowych i dokonując przekształceń, otrzymujemy wzory:

$$\left(\frac{\mathbf{E}_{21}^{(x)}}{E_o}\right)^2 + \left(\frac{\mathbf{E}_{31}^{(x)}}{E_o A^{(x)}}\right)^2 - 2\frac{\mathbf{E}_{21}^{(x)}\mathbf{E}_{31}^{(x)}}{E_o^2 A^{(x)}}\cos\left[(\psi_r^{(x)} - \psi_l^{(x)}) - \phi^{(x)}\right] = \\ = \sin^2\left[(\psi_r^{(x)} - \psi_l^{(x)}) - \phi^{(x)}\right]$$
(298)

$$\left(\frac{\mathbf{E}_{2\mathrm{II}}^{(x)}}{E_o}\right)^2 + \left(\frac{\mathbf{E}_{3\mathrm{II}}^{(x)}}{E_o B^{(x)}}\right)^2 - 2\frac{\mathbf{E}_{2\mathrm{II}}^{(x)} \mathbf{E}_{3\mathrm{II}}^{(x)}}{E_o^2 B^{(x)}} \cos\left[(\psi_l^{(x)} - \psi_r^{(x)}) - \phi^{(x)}\right] = \\ = \sin^2\left[(\psi_l^{(x)} - \psi_r^{(x)}) - \phi^{(x)}\right]$$
(299)

84

Formuły (298), (299) opisują fale E_1 , E_{II} spolaryzowane eliptycznie prawo i lewo skrętnie, przemieszczające się przez ośrodek Cosseratów w postaci eliptycznych helikoid.

Zapiszemy wzory na nieskończenie małe drogi optyczne fal E_1 , E_{II} na elementarnej drodze geometrycznej dx:

$$d\Delta_r^{(x)} = (n_r^{(x)} - n_o)dx$$
(300)

$$d\Delta_l^{(x)} = (n_l^{(x)} - n_o)dx \tag{301}$$

Elementarne względne opóźnienie tych fal na drodze dx zapiszemy w postaci:

$$d\Delta^{(x)} = \left[(n^{(x)})_r - (n^{(x)})_l \right] dx$$
(302)

Po podstawieniu wzorów (258) zapiszemy:

$$d\Delta^{(x)} = C\sqrt{(\kappa_2^{(x)} - \kappa_3^{(x)})^2 + 4(\theta_x^2 + \kappa_{23}^{(x)}\kappa_{32}^{(x)})}dx$$
(303)

gdzie $C = \frac{1}{n_r^{(x)} + n_l^{(x)}} \cong \frac{1}{2n}.$

Wyrażając stałą *C* dla niewielkiej anizotropii optycznej, zapisano $n_r^{(x)} + n_l^{(x)} \cong 2n$.

Kiedy liniowo spolaryzowana fala światła wchodzi do ośrodka elastooptycznego Cosseratów, ulega rozkładowi na dwie eliptycznie spolaryzowane fale jedną prawoskrętnie drugą lewoskrętnie. Ponieważ ośrodek wykazuje wymuszoną aktywność optyczną, to dwie różnie spolaryzowane eliptycznie fale rozchodzą się z różnymi prędkościami. Po przejściu przez ośrodek każda z tych dwóch fal doznaje różnej zmiany fazy. Elementarne opóźnienie fazowe każdej z fal na drodze geometrycznej *dx* wynosi:

$$d\psi_r^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} (n_r^{(x)} - n_o) dx$$
(304)

$$d\psi_l^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} (n_l^{(x)} - n_o) dx$$
(305)

Różne opóźnienia fazowe dla fal spolaryzowanych prawo- i lewoskrętnie prowadzą do obrotu azymutu polaryzacji fali światła o wartość:

$$d\Gamma_{x} = d\psi_{r}^{(x)} - d\psi_{l}^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} d\Delta^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} \Big[(n^{(x)})_{r} - (n^{(x)})_{l} \Big] dx =$$
$$= \frac{\pi}{\lambda n} \sqrt{(\kappa_{2}^{(x)} - \kappa_{3}^{(x)})^{2} + 4(\theta_{x}^{2} + \kappa_{23}^{(x)} \kappa_{32}^{(x)})} dx$$
(306)

Obrót azymutu polaryzacji powodują zarówno składowe tensora przenikalności dielektrycznej (naprężenia siłowe), jak i składowe tensora skręcenia optycznego (naprężenia momentowe).

Wzór (306) jest zapisem stanu optycznego w ośrodkach elastooptycznych z obrotową dwójłomnością wymuszoną. Przechodząc do ośrodka bez naprężeń momentowych, pominiemy skręcenie polaryzacji podstawiając $\theta_x = 0$ i dla kierunków głównych (1, 2, 3) pokrywających się z kierunkami (*x*, *y*, *z*) oraz wobec niewielkiej anizotropii optycznej (ośrodek quasi-izotropowy) i braku udziału sumy współczyn-

ników załamania na stan dwójłomności
$$\left(C \cong \frac{1}{2n}\right)$$
, otrzymamy:
 $d\Delta^{(x)} = C(\kappa_2 - \kappa_3) dx$ (307)

Jest to wzór zgodny ze stosowanym w klasycznej elastooptyce [65]. Podstawimy wzory (250), (251) do (306) i dla światła przebiegającego w kierunku *x* otrzymamy elementarne względne opóźnienie fal światła przechodzących przez ośrodek Cosseratów, wyrażone poprzez składowe tensora naprężenia siłowego i momentowego:

$$d\Delta^{(x)} = C\sqrt{(C_1^{\sigma})^2 \left[(\sigma_2^{(x)} - \sigma_3^{(x)})^2 + 4\tau_{23}^{(x)}\tau_{32}^{(x)} \right] + 4\left[a + C_1^{\mu}\mu_x + C_2^{\mu}(\mu_x + \mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)}) \right]^2} dx$$
(308)

W przypadku ośrodka bez naprężeń momentowych, dla kierunków głównych (1, 2, 3), kiedy światło przechodzi w kierunku (x) pokrywającym się z kierunkiem 1, na podstawie (308) zapiszemy wzór:

$$d\Delta^{(x)} = C_1(\sigma_2 - \sigma_3) \, dx \tag{309}$$

gdzie $C_1 = \frac{C_1^{\sigma}}{2n}$; stosowany w klasycznej elastooptyce [65].

10.4. Czysty stan naprężenia momentowego

Badany stan optyczny zapisany za pomocą tensora (253) przedstawimy w sposób uproszczony zachowując tylko te składowe, które wpływają na stan fali światła przechodzącej wzdłuż osi *x*. Ten uproszczony zapis przedstawimy w postaci sumy:

$$\begin{bmatrix} \kappa_2^{(x)} & \kappa_{23}^{(x)} - i\theta_x \\ \kappa_{32}^{(x)} + i\theta_x & \kappa_3^{(x)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i\theta_x \\ i\theta_x & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \kappa_2^{(x)} & \kappa_{23}^{(x)} \\ \kappa_{32}^{(x)} & \kappa_3^{(x)} \end{bmatrix}$$
(310)

gdzie pierwszy składnik opisuje czysty stan obrotowej dwójłomności wymuszonej i jednocześnie czysty stan naprężenia momentowego. Dalej zakładamy, że: $\kappa_2^{(x)} = \kappa_3^{(x)} = 0$ oraz $\kappa_{23}^{(x)} = \kappa_{32}^{(x)} = 0$ i z układu (256) otrzymujemy pierwiastki rozwiązania niezerowego:

$$(n_l^{(x)})^2 = -\theta_x$$
(311)

$$(n_r^{(x)})^2 = \theta_x \tag{312}$$

Podstawiając tak otrzymane wartości współczynnika załamania do układu równań (271), otrzymamy dwa niezależne rozwiązania:

$$\frac{E_2^{(x)}}{E_3^{(x)}} = \pm i \tag{313}$$

Oznacza to, że dwie fale światła:

$$\mathbf{E}_{\mathrm{I}} = \begin{bmatrix} 0, 2E_o, 2iE_o \end{bmatrix} \exp\left[i(\omega t - \psi_l^{(x)})\right]$$
(314)

$$\mathbf{E}_{\mathrm{II}} = \left[0, 2E_o, -2iE_o\right] \exp\left[i(\omega t - \psi_r^{(x)})\right]$$
(315)

przechodzące przez ośrodek w kierunku *x*, są spolaryzowane kołowo prawo- i lewo-skrętnie.

Uwzględniając część rzeczywistą rozwiązań i dodając drgania wzajemnie prostopadłe, otrzymujemy dwie pary składowych natężenia pola elektrycznego:

$$E_{I} \begin{cases} E_{2I}^{(x)} = E_{o} \cos(\omega t - \psi_{l}^{(x)}) \\ E_{3I}^{(x)} = E_{o} \cos\left(\omega t - \psi_{l}^{(x)} + \frac{\pi}{2}\right) \end{cases}$$
(316)

$$E_{II} \begin{cases} E_{2II}^{(x)} = E_o \cos(\omega t - \psi_r^{(x)}) \\ E_{3II}^{(x)} = E_o \cos\left[\left(\omega t - \psi_r^{(x)} - \frac{\pi}{2}\right)\right] \end{cases}$$
(317)

(Czynnik 2 jako nieistotny pominięto). W układzie (x, y, z) fale E_1 , E_{II} można przedstawić jak na rys. 28.



Rys. 28. Model pomiaru przewidywanego skręcenia płaszczyzny polaryzacji na drodze geometrycznej *dx* pod wpływem naprężeń momentowych

Liniowo spolaryzowana fala światła wchodząca do ośrodka Cosseratów ulega rozkładowi na dwie spolaryzowane kołowo fale, jedną prawo- i drugą lewoskrętnie, które na skutek stanu naprężenia momentowego przechodzą przez ośrodek z różnymi prędkościami. Elementarne opóźnienie fazowe każdej z fal na drodze *dx* wynosi:

$$d\Psi_r^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} (n_r^{(x)} - n_o) dx \tag{318}$$

$$d\psi_l^{(x)} = \frac{2\pi}{\lambda} (n_l^{(x)} - n_o) dx \tag{319}$$

Na skutek różnej zmiany faz fal spolaryzowanych prawo- i lewoskrętnie (318), (319) wystąpi elementarne skręcenie azymutu polaryzacji o wartość:

$$d\Gamma_{x} = \frac{1}{2} (d\psi_{r}^{(x)} - d\psi_{l}^{(x)}) = \frac{\pi}{\lambda} (n_{r}^{(x)} - n_{l}^{(x)}) dx = \frac{\pi}{\lambda n_{o}} \theta_{x} dx$$
(320)

10.5. Analiza w polaryskopie dla przechodzącej wiązki światła

Zastosujemy opis zmian polaryzacyjno-fazowych w kolejnych obszarach na drodze geometrycznej światła nawiązując do macierzy Jonesa [52].

Efekt polaryzacji kołowej prawoskrętnej opisywany jest macierzą:

$$\begin{bmatrix} 1+e^{-i\psi_r} & -i(1-e^{-i\psi_r})\\ i(1-e^{-i\psi_r}) & 1+e^{-i\psi_r} \end{bmatrix}$$
(321)

gdzie $i = \sqrt{-1}$, natomiast polaryzację kołową lewoskrętną opisuje macierz:

$$\begin{bmatrix} 1+e^{-i\psi_l} & i(1-e^{-i\psi_l})\\ -i(1-e^{-i\psi_l}) & 1+e^{-i\psi_l} \end{bmatrix}$$
(322)

Łącząc (321) i (322), przedstawimy obrotową (chiralną) dwójłomność wymuszoną w postaci iloczynu:

$$\begin{bmatrix} 1+e^{-i\psi_{r}} & -i(1-e^{-i\psi_{r}}) \\ i(1-e^{-i\psi_{r}}) & 1+e^{-i\psi_{r}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1+e^{-i\psi_{l}} & i(1-e^{-i\psi_{l}}) \\ -i(1-e^{-i\psi_{l}}) & 1+e^{-i\psi_{l}} \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} e^{-i\psi_{r}}+e^{-i\psi_{l}} & i(e^{-i\psi_{r}}-e^{-i\psi_{l}}) \\ -i(e^{-i\psi_{r}}-e^{-i\psi_{l}}) & e^{-i\psi_{r}}+e^{-i\psi_{l}} \end{bmatrix}$$
(323)

Zakładając, że na wejściu do ośrodka Cosseratów wektor natężenia pola elektrycznego E_o wykonuje drgania w kierunku osi z (rys. 28), polaryzator daje światło spolaryzowane poziomo. Po wyjściu z ośrodka światło będzie przechodzić przez analizator dający światło spolaryzowane pionowo (skrzyżowane osie polaryskopu), obserwowany wektor pola elektrycznego wykonuje drgania w kierunku osi y (rys. 29). Układ taki opiszemy iloczynem macierzy:

$$\begin{bmatrix} E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\psi_r} + e^{-i\psi_l} & i(e^{-i\psi_r} - e^{-i\psi_l}) \\ -i(e^{-i\psi_r} - e^{-i\psi_l}) & e^{-i\psi_r} + e^{-i\psi_l} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_o \end{bmatrix}$$
(324)

Następnie po wykonaniu mnożenia zapiszemy:

$$[E] = \begin{bmatrix} E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i(e^{-i\psi_r} - e^{-i\psi_l}) \\ 0 \end{bmatrix} [E_o]$$
(325)

Wobec powyższego wzór na obserwowany wektor pola elektrycznego przedstawimy w postaci:

$$E = E_y = E_o \left[i(e^{-i\psi_r} - e^{-i\psi_l}) \right]$$
(326)

Stosując wzór Eulera, otrzymujemy:

$$E = E_o \left[(\sin \psi_r - \sin \psi_l) + i (\cos \psi_r - \cos \psi_l) \right]$$
(327)

Natężenie światła dla skrzyżowanych polaryzatorów przedstawimy jako iloczyn składowej E oraz składowej zespolonej sprzężonej E^* :

$$\mathbf{I}^+ = EE^* \tag{328}$$

otrzymując:

$$I^{+} = E_{o}^{2} \left[(\sin \psi_{r} - \sin \psi_{l})^{2} + (\cos \psi_{r} - \cos \psi_{l})^{2} \right]$$
(329)

Podstawiając wzory trygonometryczne na różnicę sinusów i kosinusów kątów, zapiszemy:

$$I^{+} = E_{o}^{2} \left[4\cos^{2} \frac{\psi_{r} + \psi_{l}}{2} \sin^{2} \frac{\psi_{r} - \psi_{l}}{2} - 4\sin^{2} \frac{\psi_{r} + \psi_{l}}{2} \sin^{2} \frac{\psi_{r} - \psi_{l}}{2} \right]$$
(330)

Porządkując wzór (330), otrzymamy:

$$I^{+} = 4E_{o}^{2}\cos(\psi_{r} + \psi_{l})\sin^{2}\frac{\psi_{r} - \psi_{l}}{2}$$
(331)

Wprowadzimy oznaczenie czynnika wpływającego jedynie na tło pomiaru w postaci:

$$E_o = 4E_o^2 \cos(\psi_r + \psi_l)$$
(332)

i ostatecznie otrzymamy:

$$I^{+} = E_o \sin^2 \frac{\Psi_r - \Psi_l}{2}$$
(333)

Dla punktów pomiarowych, w których spełniony jest warunek:

$$\frac{\Psi_r - \Psi_l}{2} = m\pi, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(334)

otrzymujemy:

$$I^+ = 0$$
 (335)



Rys. 29. Układ geometryczny polaryskopu transmisyjnego o osiach skrzyżowanych do pomiaru naprężenia momentowego

Dla światła przechodzącego drogę geometryczną $\overline{\Delta x}$ (rys. 29), na podstawie równania (320), zapiszemy wzór wiążący wektor obrotu θ_x i skręcenie azymutu polaryzacji $\Gamma_{\overline{\Delta x}}^+$:

$$\Gamma_{\Delta x}^{+} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\Delta x)} \theta_x dx$$
(336)

Ostatecznie otrzymamy spełnienie zależności (335) przy warunku:

$$\Gamma_{\Delta x}^{+} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\Delta x)} \Theta_x dx = m\pi, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(337)

Podstawiając do (337) wzór na definicję wektora obrotu (252) dla fali światła przechodzącej w kierunku x ($s_x = 1$, $s_y = s_z = 0$), zapiszemy:

$$\int_{(\Delta x)} \theta_x dx = \int_{(\Delta x)} a_x dx$$
(338)

Podstawiając z kolei zależność (251) zapisaną dla kierunków optycznie czynnych, w układzie (x, 2, 3) otrzymamy:

$$\int_{\Delta x} \left[a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}(\mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)}) \right] dx = \lambda n_o m, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(339)

Wobec tego w punktach, w których I = 0 znamy scałkowany stan naprężeń momentowych opisany równaniem (339). Numerację punktów pomiarowych m = 0, 1, 2, 3, ... zaczynamy od nieobciążonego brzegu modelu. Jeżeli stan naprężeń momentowych nie zmienia się na drodze geometrycznej $\overline{\Delta x}$, to wzór (339) przedstawimy w postaci:

$$a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu} \left(\mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)}\right) = K_{\mu}m, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(340)

gdzie $K_{\mu} = \frac{\lambda n_o}{\Delta x}$. Dla stanu hydrostatycznego, kiedy: $\mu_x = \mu_2^{(x)} = \mu_3^{(x)} = \mu$ oraz jeżeli dodatkowo ośrodek nie wykazuje naturalnej dwójłomności obrotowej (a = 0), otrzymamy:

$$\mu = K_{\mu}^{h} m, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(341)

gdzie:

$$K^{h}_{\mu} = \frac{\lambda n_{o}}{(C^{\mu}_{1} + 3C^{\mu}_{2})\overline{\Delta x}} - \text{stała elastooptyczna ośrodka Cosseratów dla stanu hydrostatycznego.}$$

Podobną analizę przeprowadzimy dla równoległych osi polaryskopu (rys. 30). W tym przypadku iloczyn macierzy Jonesa przedstawimy w postaci:

$$[E] = \begin{bmatrix} E_{y} \\ E_{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} & i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) \\ -i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) & e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} [E_{o}]$$
(342)

Wykonując mnożenie w równaniu (342) w pierwszym etapie otrzymujemy macierz zmian polaryzacyjno-fazowych:

$$[E] = \begin{bmatrix} E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ e^{-i\psi_r} + e^{-i\psi_l} \end{bmatrix} [E_o]$$
(343)

i ostatecznie otrzymujemy:

$$E = E_{z} = E_{o} \left(e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} \right)$$
(344)

Stosując wzór Eulera, równanie (344) zapiszemy w postaci:

$$E = E_o \left[\left(\cos \psi_r + \cos \psi_l \right) - i \left(\sin \psi_r + \sin \psi_l \right) \right]$$
(345)

Natężenie światła rozproszonego przedstawimy jako iloczyn składowej E oraz składowej zespolonej sprzężonej E^* i wykonując mnożenie tych składowych, otrzymujemy:

$$\mathbf{I}^{||} = E_o^2 \Big[(\cos \psi_r + \cos \psi_l)^2 + (\sin \psi_r + \sin \psi_l)^2 \Big]$$
(346)

Podstawiając wzory trygonometryczne na sumę sinusów i kosinusów kątów ψ_r oraz ψ_p zapiszemy:

$$\mathbf{I}^{||} = E_o^2 \left[4\cos^2\frac{\psi_r + \psi_l}{2}\cos^2\frac{\psi_r - \psi_l}{2} + 4\sin^2\frac{\psi_r + \psi_l}{2}\cos^2\frac{\psi_r - \psi_l}{2} \right]$$
(347)

Porządkując wzór (347), otrzymamy:

$$\mathbf{I}^{||} = 4E_o^2 \cos^2 \frac{\Psi_r - \Psi_l}{2}$$
(348)

Ostatecznie zapiszemy:

$$\mathbf{I}^{||} = \mathbf{E}_o \cos^2 \frac{\mathbf{\Psi}_r - \mathbf{\Psi}_l}{2} \tag{349}$$

gdzie $E_o = 4E_o^2$. Jeżeli w ośrodku Cosseratów na drodze $\overline{\Delta x}$ występuje skręcenie azymutu polaryzacji o kąt $\Gamma_{\Delta x}^{||} = \frac{\Psi_r - \Psi_l}{2}$ (rys. 30), to w punktach pomiarowych, w których:

$$\frac{\Psi_r - \Psi_l}{2} = (2m - 1)\frac{\pi}{2}, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(350)

obserwujemy wygaszenie światła:

$$\mathbf{I}^{||} = \mathbf{0} \tag{351}$$

Podobnie jak poprzednio, posługując się zależnością (252) i (350), otrzymamy:

$$\frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\Delta x)} \theta_x dx = (2m-1)\frac{\pi}{2}, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(352)

Podstawiając do (352) wzór na definicję wektora obrotu (252) i dalej zależność (251), otrzymamy:

$$\int_{\Delta x} \left[a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}(\mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)}) \right] dx = \frac{\lambda n_o}{2} (2m - 1), \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(353)



Rys. 30. Układ geometryczny polaryskopu transmisyjnego o osiach równoległych do pomiaru naprężenia momentowego

Jeżeli wyrażenie podcałkowe w równaniu (353) jest stałe na drodze $\overline{\Delta x}$, to zapiszemy:

$$a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}(\mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)}) = K_{\mu}\left(m - \frac{1}{2}\right), \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(354)

Dla stanu hydrostatycznego $\mu_x = \mu_2^{(x)} = \mu_3^{(x)} = \mu$, przy a = 0:

$$\mu = K_{\mu}^{h} \left(m - \frac{1}{2} \right), \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(355)

10.6. Analiza w świetle rozproszonym

Ustalimy, że na wejściu do ośrodka wektor natężenia pola elektrycznego wykonuje drgania w kierunku z (rys. 31) i obserwacje fali światła rozproszonego będą dokonywane wzdłuż kierunku y. Przy takim ustawieniu stan polaryzacyjno-fazowy obserwowanej wiązki rozproszonej zapiszemy w postaci macierzy (324), a wzór na natężenie światła rozproszonego będzie miał postać wg wzoru (329).

Obserwując światło rozproszone na drodze geometrycznej wzdłuż wiązki przechodzącej przez ośrodek w kierunku *x*, możemy zlokalizować punkty o zerowym natężeniu światła I^z = 0, w których spełniony jest warunek (335): $\Gamma^{z}(x) = \frac{(\psi_{r} - \psi_{l})}{2} = \pi m(x), \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$ Z drugiej strony, przekształcając wzór (320), otrzymamy:

$$\frac{\lambda n_o}{\pi} \frac{d\Gamma^z}{dx} = \Theta_x \tag{356}$$



kierunek biegu światła



Jeżeli na skutek obserwacji światła rozproszonego wyznaczymy m(x), to na podstawie (320), (334) i (356) w dowolnym punkcie na drodze x zapiszemy:

$$\lambda n_o \frac{dm}{dx} = \Theta_x \tag{357}$$

Podobnie jak poprzednio, podstawimy wzór (252), oraz wobec tego, że wiązka światła przechodzi w kierunku x ($s_x = 1$, $s_y = s_z = 0$), to:

$$\lambda n_o \frac{dm}{dx} = a_x \tag{358}$$

Podstawiając z kolei (251), otrzymamy:

$$\lambda n_o \frac{dm}{dx} = a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}(\mu_2^{(x)} + \mu_3^{(x)})$$
(359)

Dla stanu hydrostatycznego $\mu_x = \mu_2^{(x)} = \mu_3^{(x)} = \mu$ oraz bez naturalnej dwójłomności obrotowej, a = 0, otrzymamy:

$$K_{\mu}^{1}\frac{dm}{dx} = \mu \tag{360}$$

gdzie $K_{\mu}^{1} = \frac{\lambda n_{o}}{(C_{1}^{\mu} + 3C_{2}^{\mu})}, \ K_{\mu}^{1} = K_{\mu}\overline{\Delta x}.$

Opis pomiaru przyrostu kąta azymutu polaryzacji w dowolnym punkcie na drodze geometrycznej wzdłuż wiązki światła, względem polaryzacji fali wejściowej, rozpoczniemy od zapisania iloczynu macierzy dla obserwacji dokonywanej wzdłuż osi z nieruchomego układy laboratoryjnego, gdzie w miejsce ostatniego czynnika opisującego polaryzację światła rozproszonego wprowadzimy macierz obrotu o kąt α^{z} (wektor fali na wejściu wykonuje drgania wzdłuż osi z – rys. 31):

$$\begin{bmatrix} E_{\alpha}^{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha^{z} & -\sin \alpha^{z} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} & i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) \\ -i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) & e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{o} \end{bmatrix}$$
(361)

Po wykonaniu mnożenia otrzymujemy:

$$[E_{\alpha}^{z}] = \begin{bmatrix} i\cos\alpha^{z}(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) - \sin\alpha^{z}(e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}}) \\ 0 \end{bmatrix} [E_{o}]$$
(362)

Po wykonaniu działań z zastosowaniem wzoru Eulera, wzorów trygonometrycznych oraz zapisując sprzężenie zespolone składowych wektora natężenia pola elektrycznego, otrzymujemy ostatecznie wzór na natężenie światła:

$$I_{\alpha}^{z} = 2E_{o}\sin\left(\alpha^{z} - \frac{\psi_{r} - \psi_{l}}{2}\right)$$
(363)

Obracając model o kąt równy:

$$\alpha^z = \frac{\Psi_r - \Psi_l}{2} \tag{364}$$

uzyskamy w badanym punkcie o współrzędnej *x* wygaszenie światła: $I_{\alpha}^{z} = 0$. Zmierzony kąt α^{z} jest równy poszukiwanej wartości kąta azymutu polaryzacji (rys. 31):

$$\alpha^z = \Gamma^z(x) \tag{365}$$

W celu opisu obserwacji wektora drgającego wzdłuż osi *y* nieruchomego układu laboratoryjnego (rys. 32) zapiszemy iloczyn macierzy:

$$\begin{bmatrix} E_{\alpha}^{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sin \alpha^{y} & \cos \alpha^{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} & i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) \\ -i(e^{-i\psi_{r}} - e^{-i\psi_{l}}) & e^{-i\psi_{r}} + e^{-i\psi_{l}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{o} \end{bmatrix}$$
(366)

Po wykonaniu mnożenia wg równania (366) i zapisaniu iloczynu składowych zespolonych sprzężonych otrzymamy ostatecznie wzór na natężenie światła rozproszonego:

$$I_{\alpha}^{\nu} = 2E_o \cos\left[\alpha^{\nu} - \frac{(\psi_r - \psi_l)}{2}\right]$$
(367)

Obracając model o kąt:

$$\alpha^{\nu} = \frac{(\psi_r - \psi_l)}{2} \tag{368}$$

spełnimy warunki obserwacji dla których: $I_{\alpha}^{\nu} = I_{max}$. W punkcie tym (rys. 32) poszukiwany azymut wynosi:

$$\Gamma^{y}(x) = \alpha^{y} \tag{369}$$



Rys. 32. Układ pomiarowy do wyznaczenia naprężeń momentowych metodą światła rozproszonego (obserwacja w kierunku *y*)

Jeżeli w opisany sposób przeprowadzimy pomiary przyrostu azymutu polaryzacji $\Gamma(x_1)$, $\Gamma(x_2)$ w dwóch punktach na drodze światła oddalonych od siebie o $\Delta x = x_2 - x_1$, to możemy wyznaczyć poszukiwaną wartość pochodnej ze wzoru (356) w postaci różnie skończonych:

$$\frac{d\Gamma}{dx} \approx \frac{\Delta\Gamma}{\Delta x} = \frac{\Gamma(x_2) - \Gamma(x_1)}{x_2 - x_1}$$
(370)

10.7. Układ równań do wyznaczenia składowych tensora naprężenia momentowego

Przez punkt pomiarowy modelu przeprowadzamy skupioną wiązkę światła w kierunkach $x^{(k)}$, gdzie (k) = 1, 2, 3, ... to numeracja kierunków przebiegu światła. W punkcie pomiarowym definiujemy:

(x, y, z) – układ obliczeniowy,

 $(x^{(k)} = X^{(k)}, Y^{(k)}, Z^{(k)})$ – układ laboratoryjny,

 $(x^{(k)} = X^{(k)} = 1^{(k)}, 2^{(k)}, 3^{(k)})$ – układ kierunków optycznie czynnych wyznaczony przez kierunek przebiegu światła $x^{(k)}$ oraz kierunki ekstremalnych naprężeń momentowych w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku $x^{(k)}$.

Układ $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$, pierwotnie pokrywający się z układem (x, y, z), obracamy wokół osi z o kąt $\vartheta^{(k_z)}$ (rys. 33).



Rys. 33. Wzajemne położenie układu obliczeniowego (x, y, z), laboratoryjnego $(X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$ oraz kierunków optycznie czynnych $(1^{(k_z)}, 2^{(k_z)}, 3^{(k_z)})$, względem kierunku światła przechodzącego w płaszczyźnie (x, y)

Oznaczenie (k_z) dotyczy numeracji kierunków przebiegu światła przechodzącego przez ośrodek w płaszczyźnie (x, y) układu obliczeniowego. Kierunek $x^{(k_z)} = X^{(k_z)}$ będzie stanowił kierunek związany z naprężeniem $\mu_1^{(k_z)}$ czyli $x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}$. Następnie wykonujemy obrót w układzie $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$ wokół osi $x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}$ o kąt $\alpha^{(k_z)}$ aż do zlokalizowania kierunków związanych z dwoma pozostałymi naprężeniami $\mu_2^{(k_z)}$, $\mu_3^{(k_z)}$. Kąt $\alpha^{(k_z)}$ opisuje więc kierunki $2^{(k_z)}, 3^{(k_z)}$.

W układzie $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, 2^{(k_z)}, 3^{(k_z)})$ otrzymamy tensor naprężenia momentowego:

$$\begin{pmatrix} \mu_{1}^{(k_{z})} = \mu_{X}^{(k_{z})} & \mu_{12}^{(k_{z})} & \mu_{13}^{(k_{z})} \\ \mu_{21}^{(k_{z})} & \mu_{2}^{(k_{z})} & \mu_{23}^{(k_{z})} \\ \mu_{31}^{(k_{z})} & \mu_{32}^{(k_{z})} & \mu_{3}^{(k_{z})} \end{pmatrix}$$
(371)

Pomiary będą wykonywane w świetle rozproszonym, więc dla wybranego punktu na drodze geometrycznej $x^{(k_z)}$ zapiszemy:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_z)}(x^{(k_z)})}{dx^{(k_z)}} = a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_1^{(k_z)} + C_2^{\mu}(\mu_2^{(k_z)} + \mu_3^{(k_z)})$$
(372)

Następnie dokonujemy transformacji składowych tensora naprężenia momentowego z układu $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, 2^{(k_z)}, 3^{(k_z)})$ do układu $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$ poprzez kąty $\alpha^{(k_z)}$:

$$(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, 2^{(k_z)}, 3^{(k_z)}) \xrightarrow{\alpha^{(k_z)}} (x^{(k_z)} = X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$$
(373)

Tensor naprężenia momentowego w nowym układzie $(X^{(k_z)} = x^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$ zapiszemy w postaci:

$$\begin{pmatrix} \mu_X^{(k_z)} = \mu_1^{(k_z)} & \mu_{XY}^{(k_z)} & \mu_{XZ}^{(k_z)} \\ \mu_{YX}^{(k_z)} & \mu_Y^{(k_z)} & \mu_{YZ}^{(k_z)} \\ \mu_{ZX}^{(k_z)} & \mu_{ZY}^{(k_z)} & \mu_Z^{(k_z)} \end{pmatrix}$$
(374)

Tabela 1

Stosując wzór transformacyjny: $\mu_{ij} = t_{ik} t_{jl} \mu_{kl}$, gdzie *i*, *j* to wskaźniki układu kierunków naprężeń optycznie czynnych (1^(k₂), 2^(k_z), 3^(k_z)), *k*, *l* to wskaźniki należące do układu laboratoryjnego ($X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)}$), natomiast współczynniki transformacji t_{ik}, t_{ij} dobierane są wg tab. 1:

Współczynniki transformacji			
	X	Y	Ζ
$1^{(k_z)}$	1	0	0
$2^{(k_z)}$	0	$\cos \alpha^{(k_z)}$	$\sin \alpha^{(k_z)}$
$3^{(k_z)}$	0	$-\sin \alpha^{(k_z)}$	$\cos \alpha^{(k_z)}$

Otrzymujemy:

$$\mu_1^{(k_z)} = \mu_X^{(k_z)} \tag{375}$$

98

$$\mu_2^{(k_z)} = \mu_Y^{(k_z)} \cos^2 \alpha^{(k_z)} + \mu_Z^{(k_z)} \sin^2 \alpha^{(k_z)} + (\mu_{YZ}^{(k_z)} + \mu_{ZY}^{(k_z)}) \sin \alpha^{(k_z)} \cos \alpha^{(k_z)}$$
(376)

$$\mu_{3}^{(k_{z})} = \mu_{Z}^{(k_{z})} \cos^{2} \alpha^{(k_{z})} + \mu_{Y}^{(k_{z})} \sin^{2} \alpha^{(k_{z})} - (\mu_{YZ}^{(k_{z})} + \mu_{ZY}^{(k_{z})}) \sin \alpha^{(k_{z})} \cos \alpha^{(k_{z})}$$
(377)

Kąt $\alpha^{(k_z)}$ spełnia warunek $\frac{d\mu_2^{(k_z)}}{d\alpha^{(k_z)}} = 0$, $\frac{d\mu_3^{(k_z)}}{d\alpha^{(k_z)}} = 0$, co daje ostatecznie:

$$tg2\alpha^{(k_z)} = \frac{\mu_{YZ}^{(k_z)} + \mu_{ZY}^{(k_z)}}{\mu_{Y}^{(k_z)} - \mu_{Z}^{(k_z)}}$$
(378)

Dalej dokonujemy transformacji składowych tensora naprężenia momentowego z układu laboratoryjnego $(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)})$ do układu obliczeniowego $(x, y, z = Z^{(k_z)})$ poprzez kąt $9^{(k_z)}$:

$$(x^{(k_z)} = X^{(k_z)} = 1^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)}) \xrightarrow{\mathfrak{g}^{(k_z)}} (x, y, z = Z^{(k_z)})$$
(379)

Tensor naprężenia momentowego w układzie obliczeniowym $(x, y, z = Z^{(k_z)})$ ma postać:

$$\begin{pmatrix} \mu_x & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_y & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_z = \mu_Z^{(k_z)} \end{pmatrix}$$
(380)

Tabela 2

Stosujemy taki sam wzór transformacyjny $\mu_{ij} = t_{ik} t_{jl} \mu_{kl}$, gdzie tym razem wskaźniki $i, j = X^{(k_z)}, Y^{(k_z)}, Z^{(k_z)}$, natomiast k, l = x, y, z, podczas gdy współczynniki t_{ik}, t_{il} dobrane są wg tab. 2:

			Tabela	
Współczynniki transformacji				
	x	у	Ζ	
$X^{(k_z)}$	$\cos \vartheta^{(k_z)}$	$\sin \vartheta^{(k_z)}$	0	
$Y^{(k_z)}$	$-\sin \vartheta^{(k_z)}$	$\cos \vartheta^{(k_z)}$	0	
$Z^{(k_z)}$	0	0	1	

Otrzymujemy:

$$\mu_X^{(k_z)} = \mu_x \cos^2 \vartheta^{(k_z)} + \mu_y \sin^2 \vartheta^{(k_z)} + (\mu_{xy} + \mu_{yx}) \sin \vartheta^{(k_z)} \cos \vartheta^{(k_z)}$$
(381)

$$\mu_{Y}^{(k_{z})} = \mu_{y} \cos^{2} \vartheta^{(k_{z})} + \mu_{x} \sin^{2} \vartheta^{(k_{z})} - (\mu_{xy} + \mu_{yx}) \sin \vartheta^{(k_{z})} \cos \vartheta^{(k_{z})}$$
(382)

100

$$\mu_Z^{(k_z)} = \mu_z \tag{383}$$

$$\mu_{YZ}^{(k_z)} = \mu_{yz} \cos \vartheta^{(k_z)} - \mu_{xz} \sin \vartheta^{(k_z)}$$
(384)

$$\mu_{ZY}^{(k_z)} = \mu_{zy} \cos \vartheta^{(k_z)} - \mu_{zx} \sin \vartheta^{(k_z)}$$
(385)

Łącząc (375)-(377) oraz (381)-(385), zapiszemy równanie (372) w postaci:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_z)}(x^{(k_z)})}{dx^{(k_z)}} = a + (C_1^{\mu} \cos^2 \vartheta^{(k_z)} + C_2^{\mu})\mu_x + (C_1^{\mu} \sin^2 \vartheta^{(k_z)} + C_2^{\mu})\mu_y + C_2^{\mu}\mu_z + C_1^{\mu} \sin \vartheta^{(k_z)} \cos \vartheta^{(k_z)}(\mu_{xy} + \mu_{yx})$$
(386)

W równaniu (386) jest pięć niewiadomych: μ_x , μ_y , μ_z , μ_{xy} , μ_{yx} , które wyznaczymy zapisując układ pięciu równań typu (386) dla pięciu kierunków prześwietlania modelu $k_z = 1, ..., 5$ definiowanych kątami $9^{(k_z)}$, tak aby każdy z tych kierunków przechodził przez punkt pomiarowy. Obserwując światło rozproszone dla tak przeprowadzonych kierunków światła, wyznaczymy dla każdego kierunku w badanym punkcie wartość $\frac{d\Gamma^{(k_z)}(x^{(k_z)})}{dx^{(k_z)}}, k_z = 1, ..., 5.$

Następnie wybierając kierunek $x^{(k_x)}$ tak, aby pokrywał się z osią $Y^{(k_x)}$ układu laboratoryjnego i jednocześnie leżał w płaszczyźnie (y, z) układu obliczeniowego (rys. 34), dokonamy metodą światła rozproszonego, w wybranym punkcie na kie-

runku $x^{(k_x)}$, pomiar wielkości $\frac{d\Gamma^{(k_x)}(x^{(k_x)})}{dx^{(k_x)}}$.



Rys. 34. Wzajemne położenie układu obliczeniowego (x, y, z), laboratoryjnego $(X^{(k_x)}, Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)})$ oraz kierunków optycznie czynnych $(1^{(k_x)}, 2^{(k_x)}, 3^{(k_x)})$, względem kierunku światła przechodzącego w płaszczyźnie (y, z)

Dla składowych optycznie czynnych tensora naprężenia momentowego przedstawionych w postaci:

$$\begin{pmatrix} \mu_{1}^{(k_{x})} = \mu_{Y}^{(k_{x})} & \mu_{12}^{(k_{x})} & \mu_{13}^{(k_{x})} \\ \mu_{21}^{(k_{x})} & \mu_{2}^{(k_{x})} & \mu_{23}^{(k_{x})} \\ \mu_{31}^{(k_{x})} & \mu_{32}^{(k_{x})} & \mu_{3}^{(k_{x})} \end{pmatrix}$$
(387)

zapiszemy równanie elastooptyki Cosseratów:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_x)}(x^{(k_x)})}{dx^{(k_x)}} = a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_1^{(k_x)} + C_2^{\mu}(\mu_2^{(k_x)} + \mu_3^{(k_x)})$$
(388)

Układ laboratoryjny $(X^{(k_x)}, x^{(k_x)} = Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)})$ jest obrócony teraz o kąt $\vartheta^{(k_x)}$ wokół osi *x* układu obliczeniowego, a układ kierunków optycznie czynnych $(x^{(k_y)} = Y^{(k_y)} = 1^{(k_y)}, 2^{(k_y)}, 3^{(k_y)})$ znajdujemy podobnie jak poprzednio, tzn. kierunek $1^{(k_x)}$ pokrywa się z osią $x^{(k_x)} = Y^{(k_x)}$, natomiast dwa pozostałe są opisane kątem $\alpha^{(k_x)}$ spełniającym warunek na ekstremum dla naprężeń momentowych normalnych w płaszczyźnie $(Z^{(k_x)}, X^{(k_x)})$ układu laboratoryjnego: $\frac{d\mu_2^{(k_x)}}{d\alpha^{(k_x)}} = 0, \frac{d\mu_3^{(k_x)}}{d\alpha^{(k_x)}} = 0.$

Naprężenia momentowe w układzie $(1^{(k_x)} = X^{(k_x)}, Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)})$ opisuje tensor:

$$\begin{pmatrix} \mu_X^{(k_x)} & \mu_{XY}^{(k_x)} & \mu_{XZ}^{(k_x)} \\ \mu_{YX}^{(k_x)} & \mu_Y^{(k_x)} = \mu_1^{(k_x)} & \mu_{YZ}^{(k_x)} \\ \mu_{ZX}^{(k_x)} & \mu_{ZY}^{(k_x)} & \mu_Z^{(k_x)} \end{pmatrix}$$
(389)

Wykonamy przejście z układu pomiarowego do układu laboratoryjnego wg schematu:

$$(x^{(k_x)} = Y^{(k_x)} = 1^{(k_x)}, 2^{(k_x)}, 3^{(k_x)}) \xrightarrow{\alpha^{(k_x)}} (X^{(k_x)}, x^{(k_x)} = Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)})$$
(390)

Dokonując transformacji $\mu_{ij} = t_{ik}t_{jl}\mu_{kl}$, gdzie tym razem *i*, *j* to wskaźniki układu kierunków naprężeń optycznie czynnych (1^(kx), 2^(kx), 3^(kx)), *k*, *l* to wskaźniki należące do układu laboratoryjnego ($X^{(k_x)}, Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)}$), zapiszemy współczynniki transformacji t_{ik}, t_{il} wg tab. 3:

	1 5		5
	$X^{(k_x)}$	$Y^{(k_x)}$	$Z^{(k_x)}$
$1^{(k_x)}$	0	1	0
$2^{(k_x)}$	$\sin \alpha^{(k_x)}$	0	$\cos \alpha^{(k_x)}$
$3^{(k_x)}$	$\cos \alpha^{(k_x)}$	0	$-\sin \alpha^{(k_x)}$

Współczynniki transformacii

Po wykonaniu działań wg wzorów transformacji otrzymujemy:

$$\mu_I^{(k_x)} = \mu_Y^{(k_x)} \tag{391}$$

$$\mu_2^{(k_x)} = \mu_Z^{(k_x)} \cos^2 \alpha^{(k_x)} + \mu_X^{(k_x)} \sin^2 \alpha^{(k_x)} + (\mu_{XZ}^{(k_z)} + \mu_{ZX}^{(k_z)}) \sin \alpha^{(k_x)} \cos \alpha^{(k_x)}$$
(392)

$$\mu_{3}^{(k_{x})} = \mu_{X}^{(k_{z})} \cos^{2} \alpha^{(k_{x})} + \mu_{Z}^{(k_{z})} \sin^{2} \alpha^{(k_{x})} - (\mu_{XZ}^{(k_{z})} + \mu_{ZX}^{(k_{z})}) \sin \alpha^{(k_{x})} \cos \alpha^{(k_{x})}$$
(393)

gdzie kąt $\alpha^{(k_x)}$ spełnia warunek:

$$tg 2\alpha^{(k_x)} = \frac{\mu_{ZX}^{(k_x)} + \mu_{XZ}^{(k_x)}}{\mu_{Z}^{(k_x)} - \mu_{X}^{(k_x)}}$$
(394)

Tabela 4

Następnie przechodzimy do układu obliczeniowego wg schematu:

$$(X^{(k_x)}, Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)}) \xrightarrow{9^{(k_x)}} (x, y, z = Z^{(k_x)})$$
(395)

Wykonujemy kolejną transformację: $\mu_{ij} = t_{ik}t_{jl}\mu_{kl}$, gdzie tym razem *i*, *j* to wskaźniki układu laboratoryjnego ($X^{(k_x)}, Y^{(k_x)}, Z^{(k_x)}$), *k*, *l* to wskaźniki układu obliczeniowego ($X^{(k_x)} = x, y, z$), a współczynniki transformacji t_{ik}, t_{jl} zapisujemy wg tab. 4:

W społczynniki transformacji			
	x	у	Ζ
$X^{(k_x)}$	1	0	0
$Y^{(k_x)}$	0	$\cos \vartheta^{(k_x)}$	$\sin \vartheta^{(k_x)}$
$Z^{(k_x)}$	0	$-\sin \vartheta^{(k_x)}$	$\cos \vartheta^{(k_x)}$

Otrzymujemy:

$$\mu_X^{(k_x)} = \mu_x \tag{396}$$

$$\mu_Y^{(k_x)} = \mu_y \cos^2 \vartheta^{(k_x)} + \mu_z \sin^2 \vartheta^{(k_x)} + (\mu_{yz} + \mu_{zy}) \sin \vartheta^{(k_x)} \cos \vartheta^{(k_x)}$$
(397)

$$\mu_{Z}^{(k_{x})} = \mu_{z} \cos^{2} \vartheta^{(k_{x})} + \mu_{y} \sin^{2} \vartheta^{(k_{x})} - (\mu_{zy} + \mu_{yz}) \sin \vartheta^{(k_{x})} \cos \vartheta^{(k_{x})}$$
(398)

$$\mu_{XZ}^{(k_x)} = \mu_{xz} \cos \vartheta^{(k_x)} - \mu_{xy} \sin \vartheta^{(k_x)}$$
(399)

$$\mu_{ZX}^{(k_x)} = \mu_{zx} \cos \vartheta^{(k_x)} - \mu_{yx} \sin \vartheta^{(k_x)}$$
(400)

W równaniach (396)–(400) występują niewiadome: μ_x , μ_y , μ_z , μ_{xz} , μ_{zx} , μ_{yz} , μ_{zy} , składowe tensora:

$$\begin{pmatrix} \mu_x = \mu_X^{(k_x)} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_y & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_z \end{pmatrix}$$
(401)

z których trzy pierwsze zostały już zapisane w równaniu (388).

Łącząc (391)-(393) oraz (396)-(400), zapiszemy równanie (388) w postaci:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_x)}(x^{(k_x)})}{dx^{(k_x)}} = a + C_2^{\mu} \mu_x + (C_1^{\mu} \cos^2 \vartheta^{(k_x)} + C_2^{\mu}) \mu_y + + (C_1^{\mu} \sin^2 \vartheta^{(k_x)} + C_2^{\mu}) \mu_z + C_1^{\mu} \sin \vartheta^{(k_x)} \cos \vartheta^{(k_x)}(\mu_{yz} + \mu_{zy})$$
(402)

W równaniu tym niewiadome μ_{yz} , μ_{zy} wyznaczymy dokonując pomiaru $\frac{d\Gamma^{(k_x)}(x^{(k_x)})}{dx^{(k_x)}}$ dla dwóch kierunków definiowanych kątami $\vartheta^{(k_x)}$, które numerujemy $(k_x) = 6, 7.$

Pozostaje do wyznaczenia μ_{xz} , μ_{zx} . Składowe te wyznaczymy przeprowadzając skupioną wiązkę światła przez punkt pomiarowy tak, aby kierunek $x^{(k_y)}$ przechodził w płaszczyźnie (*z*, *x*), (*k*_y) oznacza numerację tych kierunków (rys. 35).



Rys. 35. Wzajemne położenie układu obliczeniowego (x, y, z), laboratoryjnego $(X^{(k_y)}, Y^{(k_y)}, Z^{(k_y)})$ oraz kierunków optycznie czynnych $(1^{(k_y)}, 2^{(k_y)}, 3^{(k_y)})$, względem kierunku światła przechodzącego w płaszczyźnie (z, x)

Wykonujemy transformację wg schematu:

$$(1^{(k_y)} = x^{(k_y)}, 2^{(k_y)}, 3^{(k_y)}) \xrightarrow{\alpha^{(k_y)}} (X^{(k_y)}, Y^{(k_y)}, Z^{(k_y)} = 1^{(k_y)})$$
(403)

Składowe tensora naprężeń momentowych w układzie kierunków optycznie czynnych:

$$\begin{pmatrix} \mu_{1}^{(k_{y})} = \mu_{Z}^{(k_{y})} & \mu_{12}^{(k_{y})} & \mu_{13}^{(k_{y})} \\ \mu_{21}^{(k_{y})} & \mu_{2}^{(k_{y})} & \mu_{23}^{(k_{y})} \\ \mu_{31}^{(k_{y})} & \mu_{32}^{(k_{y})} & \mu_{3}^{(k_{y})} \end{pmatrix}$$
(404)

wyrażamy przez składowe w układzie laboratoryjnym:

$$\begin{pmatrix} \mu_X^{(k_y)} & \mu_{XY}^{(k_y)} & \mu_{XZ}^{(k_y)} \\ \mu_{YX}^{(k_y)} & \mu_Y^{(k_y)} & \mu_{YZ}^{(k_y)} \\ \mu_{ZX}^{(k_y)} & \mu_{ZY}^{(k_y)} & \mu_Z^{(k_y)} = \mu_1^{(k_y)} \end{pmatrix}$$
(405)

Stosujemy wzór $\mu_{ij} = t_{ik} t_{jl} \mu_{kl}$, gdzie tym razem *i*, *j* to wskaźniki układu kierunków naprężeń optycznie czynnych $(1^{(k_y)}, 2^{(k_y)}, 3^{(k_y)})$, *k*, *l* to wskaźniki należące do układu laboratoryjnego $(X^{(k_y)}, Y^{(k_y)}, Z^{(k_y)} = 1^{(k_y)})$, a współczynniki transformacji t_{ik}, t_{jl} zapiszemy wg tab. 5:

······································			
	$X^{(k_y)}$	$Y^{(k_y)}$	$Z^{(k_y)}$
$1^{(k_y)}$	0	0	1
$2^{(k_y)}$	$\cos \alpha^{(k_y)}$	$\sin \alpha^{(k_y)}$	0
$3^{(k_y)}$	$-\sin \alpha^{(k_y)}$	$\cos \alpha^{(k_y)}$	0

Współczynniki transformacji

Wykonując działania, otrzymujemy:

$$\mu_1^{(k_y)} = \mu_Z^{(k_y)} \tag{406}$$

Tabela 5

$$\mu_{2}^{(k_{y})} = \mu_{X}^{(k_{y})} \cos^{2} \alpha^{(k_{y})} + \mu_{Y}^{(k_{y})} \sin^{2} \alpha^{(k_{y})} + (\mu_{XY}^{(k_{y})} + \mu_{YX}^{(k_{y})}) \sin \alpha^{(k_{y})} \cos \alpha^{(k_{y})}$$
(407)

$$\mu_{3}^{(k_{y})} = \mu_{Y}^{(k_{y})} \cos^{2} \alpha^{(k_{y})} + \mu_{X}^{(k_{z})} \sin^{2} \alpha^{(k_{y})} - (\mu_{XY}^{(k_{y})} + \mu_{YX}^{(k_{y})}) \sin \alpha^{(k_{y})} \cos \alpha^{(k_{y})}$$
(408)

104

Z kolei składowe tensora naprężeń momentowych w układzie obliczeniowym:

$$\begin{pmatrix} \mu_x & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_y = \mu_Y^{(k_z)} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_z \end{pmatrix}$$
(409)

wyrazimy przez składowe w układzie laboratoryjnym, wykonując transformację wg schematu:

$$(X^{(k_y)}, Y^{(k_y)}, Z^{(k_y)}) \xrightarrow{\mathfrak{g}^{(k_y)}} (x, y = Y^{(k_y)}, z)$$
(410)

Jeszcze raz posłużymy się wzorem: $\mu_{ij} = t_{ik}t_{jl}\mu_{kl}$, gdzie tym razem *i*, *j* to wskaźniki układu laboratoryjnego ($X^{(k_y)}, Y^{(k_y)}, Z^{(k_y)}$), *k*, *l* to wskaźniki układu obliczeniowego (*x*, *y* = $Y^{(k_y)}$, *z*), a współczynniki transformacji t_{ik} , t_{jl} zapiszemy wg tab. 6.

Tabela 6

	x	У	Ζ
$X^{(k_y)}$	$\cos \vartheta^{(k_y)}$	0	$-\sin \vartheta^{(k_y)}$
$Y^{(k_y)}$	0	1	0
$Z^{(k_y)}$	$\sin \vartheta^{(k_y)}$	0	$\cos \vartheta^{(k_y)}$

Współczynniki transformacji

Wykonując działania, otrzymujemy:

$$\mu_X^{(k_y)} = \mu_x \cos^2 \vartheta^{(k_y)} + \mu_Z \sin^2 \vartheta^{(k_y)} + (\mu_{xz} + \mu_{zx}) \sin \vartheta^{(k_y)} \cos \vartheta^{(k_y)}$$
(411)

$$\mu_Y^{(k_y)} = \mu_y \tag{412}$$

$$\mu_{Z}^{(k_{y})} = \mu_{z} \cos^{2} \vartheta^{(k_{y})} + \mu_{x} \sin^{2} \vartheta^{(k_{y})} + (\mu_{xz} + \mu_{zx}) \sin \vartheta^{(k_{y})} \cos \vartheta^{(k_{y})}$$
(413)

$$\mu_{XY}^{(k_y)} = \mu_{xy} \cos \vartheta^{(k_y)} - \mu_{zy} \sin \vartheta^{(k_y)}$$
(414)

$$\mu_{YX}^{(k_y)} = \mu_{yx} \cos \vartheta^{(k_y)} - \mu_{zy} \sin \vartheta^{(k_y)}$$
(415)

Podstawiamy (406)–(408) do (411)–(415) i tak otrzymane wzory do równania metody światła rozproszonego dla kierunku $x^{(k_y)}$:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_y)}(x^{(k_y)})}{dx^{(k_y)}} = a + (C_1^{\mu} + C_2^{\mu})\mu_1^{(k_y)} + C_2^{\mu}(\mu_2^{(k_y)} + \mu_3^{(k_y)})$$
(416)

Otrzymujemy:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_y)}(x^{(k_y)})}{dx^{(k_y)}} = a + (C_1^{\mu} \sin^2 \vartheta^{(k_y)} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}\mu_y + (C_1^{\mu} \cos^2 \vartheta^{(k_y)} + C_2^{\mu})\mu_z + C_1^{\mu} \sin \vartheta^{(k_y)} \cos \vartheta^{(k_y)}(\mu_{xz} + \mu_{zx})$$
(417)

Wykonując pomiar $\frac{d\Gamma^{(k_y)}(x^{(k_y)})}{dx^{(k_y)}}$ dla dwóch kierunków $x^{(k_y)}$, numerując te kie-

runki $k_y = 8$, 9, otrzymujemy uzupełniające dwa równania do układu niezależnych dziewięciu równań, z których obliczymy dziewięć składowych tensora naprężenia momentowego.

Poniżej przedstawimy zestawienie otrzymanych wzorów:

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_z)}(x^{(k_z)})}{dx^{(k_z)}} = a + (C_1^{\mu}\cos^2\vartheta^{(k_z)} + C_2^{\mu})\mu_x + (C_1^{\mu}\sin^2\vartheta^{(k_z)} + C_2^{\mu})\mu_y + C_2^{\mu}\mu_z + C_1^{\mu}\sin\vartheta^{(k_z)}\cos\vartheta^{(k_z)}(\mu_{xy} + \mu_{yx}), \qquad k_z = 1, ..., 5$$

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_x)}(x^{(k_x)})}{dx^{(k_x)}} = a + C_2^{\mu} \mu_x + (C_1^{\mu} \cos^2 \vartheta^{(k_x)} + C_2^{\mu}) \mu_y + (C_1^{\mu} \sin^2 \vartheta^{(k_x)} + C_2^{\mu}) \mu_z + C_1^{\mu} \sin \vartheta^{(k_x)} \cos \vartheta^{(k_x)} (\mu_{yz} + \mu_{zy}), \qquad k_x = 6,7$$

$$\lambda n_o \frac{d\Gamma^{(k_y)}(x^{(k_y)})}{dx^{(k_y)}} = a + (C_1^{\mu} \sin^2 \vartheta^{(k_y)} + C_2^{\mu})\mu_x + C_2^{\mu}\mu_y + (C_1^{\mu} \cos^2 \vartheta^{(k_y)} + C_2^{\mu})\mu_z + C_1^{\mu} \sin \vartheta^{(k_y)} \cos \vartheta^{(k_y)}(\mu_{xz} + \mu_{zx}), \qquad k_y = 8,9$$

106

11. Analogia do zjawiska Faradaya i efektu Villariego

Połączymy własności optyczne i magnetyczne ośrodka Cosseratów przyporządkowując wektorowi obrotu optycznego θ pole magnetyczne *B*^{couple} wg wzoru [46]:

$$\Theta_i = \beta_{ij} B_i^{\text{couple}} \tag{418}$$

gdzie β_{ij} jest stałą łączącą własności optyczne i magnetyczne, mającą w ogólnym przypadku postać tensora niesymetrycznego. Obrotową dwójłomność wymuszoną opiszemy teraz za pomocą wektora **B**^{couple}.

Ze wzoru (418) wynika, że wywołane naprężeniami momentowymi pole magnetyczne może być badane w świetle spolaryzowanym. Podobnie jak w przypadku naprężeń momentowych, mierzyć będziemy skręcenie azymutu polaryzacji dla światła przechodzącego lub pochodną tego skręcenia dla światła rozproszonego. Na podstawie wzoru (320), dla pomiarów w świetle przechodzącym drogę geometryczną $\overline{\Delta}_x$, $\overline{\Delta}_y$, $\overline{\Delta}_z$, zapiszemy:

$$\Gamma_{\overline{\Delta x}} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\overline{\Delta x})} \Theta_x dx = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\overline{\Delta x})} (\beta_{xx} B_x^{\text{couple}} + \beta_{xy} B_y^{\text{couple}} + \beta_{xz} B_z^{\text{couple}}) dx \quad (419)$$

$$\Gamma_{\overline{\Delta y}} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\overline{\Delta y})} \Theta_y dx = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\overline{\Delta y})} (\beta_{yx} B_x^{\text{couple}} + \beta_{yy} B_y^{\text{couple}} + \beta_{yz} B_z^{\text{couple}}) dy \quad (420)$$

$$\Gamma_{\overline{\Delta z}} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\Delta z)} \Theta_z dx = \frac{\pi}{\lambda n_o} \int_{(\overline{\Delta z})} (\beta_{zx} B_x^{\text{couple}} + \beta_{zy} B_y^{\text{couple}} + \beta_{zz} B_z^{\text{couple}}) dz \qquad (421)$$

W przypadku pomiaru w świetle rozproszonym zapiszemy podobnie:

$$\frac{d\Gamma_x}{dx} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \theta_x = \frac{\pi}{\lambda n_o} \beta_{xx} B_x^{\text{couple}} + \beta_{xy} B_y^{\text{couple}} + \beta_{xz} B_z^{\text{couple}}$$
(422)

$$\frac{d\Gamma_{y}}{dy} = \frac{\pi}{\lambda n_{o}} \theta_{y} = \frac{\pi}{\lambda n_{o}} \beta_{yx} B_{x}^{\text{couple}} + \beta_{yy} B_{y}^{\text{couple}} + \beta_{yz} B_{z}^{\text{couple}}$$
(423)

$$\frac{d\Gamma_z}{dz} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \theta_z = \frac{\pi}{\lambda n_o} \beta_{zx} B_x^{\text{couple}} + \beta_{zy} B_y^{\text{couple}} + \beta_{zz} B_z^{\text{couple}}$$
(424)

Jeżeli pole magnetyczne pochodzące od naprężeń momentowych jest jednorodne (stan hydrostatyczny): $B_x^{\text{couple}} = B_y^{\text{couple}} = B_z^{\text{couple}} = \text{const}$, oraz jeżeli: $\beta_x = \beta_y = \beta_z = \beta$, $\beta_{xy} = \beta_{yz} = \beta_{zy} = \beta_{zx} = \beta_{xz} = 0$, to równania (419)–(424) przyjmują formę analogiczną do wzoru opisującego zjawisko Faradaya:

$$\Gamma_{\overline{\Delta x}} = \frac{\pi}{\lambda n_o} \beta B^{\text{couple}} \overline{\Delta x}$$
(425)

gdzie:

 $\frac{\pi}{\lambda n_o}\beta$ – współczynnik analogiczny do stałej Verdeta V.

Posługując się powyższą analogią, zapiszemy współczynnik optyczno-magnetyczny w postaci:

$$\beta = \frac{\lambda n_o}{\pi} \mathbf{V} \tag{426}$$

W ogólnym przypadku obydwie stałe są wielkościami tensorowymi:

$$\beta_{ij} = \frac{\lambda n_o}{\pi} \mathbf{V}_{ij} \tag{427}$$

Łącząc (418), (251) oraz (252), otrzymujemy:

$$\boldsymbol{B}_{l}^{\text{couple}} = \frac{1}{\beta_{kl}} \left(a \delta_{kl} + C_{l}^{\mu} \mu_{kl} + C_{2}^{\mu} \sum \mu_{ii} \delta_{kl} \right) \boldsymbol{s}_{l}$$
(428)

Wzór (428) opisuje analogicznie do efektu Villariego [10] pole magnetyczne wywołane w tym przypadku działaniem naprężeń momentowych. Przechodząc od naprężeń zapisanych dla kierunków optycznie czynnych ustalonych przez wektor s_l do naprężeń w układzie (x, y, z), otrzymamy opis analogiczny do efektu Villariego, z tą różnicą, że jest spowodowany naprężeniami momentowymi Cosseratów. W ogólnym przypadku otrzymamy:

$$\begin{bmatrix} B_{1}^{\text{couple}} \\ B_{2}^{\text{couple}} \\ B_{3}^{\text{couple}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{21} & e_{31} & e_{41} & e_{51} & e_{61} & e_{71} & e_{81} & e_{91} \\ e_{12} & e_{22} & e_{32} & e_{42} & e_{52} & e_{62} & e_{72} & e_{82} & e_{92} \\ e_{13} & e_{23} & e_{33} & e_{43} & e_{53} & e_{63} & e_{73} & e_{83} & e_{93} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{1} \\ \mu_{2} \\ \mu_{3} \\ \mu_{4} \\ \mu_{5} \\ \mu_{6} \\ \mu_{7} \\ \mu_{8} \\ \mu_{9} \end{bmatrix}$$
(429)
gdzie $\mu_1, ..., \mu_9$ to składowe niesymetrycznego tensora naprężenia momentowego w notacji Kelvina-Voigta:

$$\begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \mu_{13} \\ \mu_{21} & \mu_{22} & \mu_{23} \\ \mu_{31} & \mu_{32} & \mu_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_8 & \mu_6 \\ \mu_9 & \mu_2 & \mu_4 \\ \mu_7 & \mu_5 & \mu_3 \end{bmatrix}$$
(430)

 $e_{11} = e_{111}, e_{21} = e_{221}, e_{31} = e_{331}, \dots$ to mechaniczno-magnetyczne stałe materiałowe Cosseratów.

Wzór (429) przedstawimy w zapisie wskaźnikowym:

$$B_m^{\text{couple}} = e_{ijm} \mu_{ij} \tag{431}$$

Możemy również opisać zjawisko odwrotne, kiedy pole magnetyczne zewnętrzne **B** wywołuje stan naprężenia momentowego (analogia do magnetostrykcji i zjawiska Joule'a). Zapiszemy ogólną postać takiej zależności:

$$\begin{bmatrix} \mu_{1} \\ \mu_{2} \\ \mu_{3} \\ \mu_{4} \\ \mu_{5} \\ \mu_{6} \\ \mu_{7} \\ \mu_{8} \\ \mu_{9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} \\ d_{17} & d_{27} & d_{37} \\ d_{18} & d_{28} & d_{38} \\ d_{19} & d_{29} & d_{39} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{1} \\ B_{2} \\ B_{3} \end{bmatrix}$$
(432)

lub stosując konwencję zapisu wskaźnikowego:

$$\mu_{ij} = d_{mij} B_m \tag{433}$$

Stałe d_{mii} , e_{iim} będą związane ze stałą Verdeta.

Występowanie zjawiska magnetostrykcji Cosseratów oznaczałoby, że naprężenie momentowe wywołane działaniem zewnętrznego pola magnetycznego mogłoby być mierzone również w doświadczeniu Faradaya. Jeżeli do materiału Cosseratów przyłożymy zewnętrzne pole magnetyczne B_x o kierunku wzdłuż osi x i przeprowadzimy wzdłuż x światło spolaryzowane liniowo, to skręcenie azymutu polaryzacji fali światła opiszemy wzorem Faradaya:

$$\Gamma_x^{\text{Faraday}} = \mathbf{V}B_x \overline{\Delta x} \tag{434}$$

Do wzoru (434) podstawimy (426), następnie (428), otrzymując w układzie kierunków optycznie czynnych ($1^{(x)}, 2^{(x)}, 3^{(x)}$), dla $s_x = 1$, poszukiwaną zależność:

$$\Gamma_{x}^{\text{Faraday}} = \frac{\pi}{\lambda n_{o}} \Big[a + (C_{1}^{\mu} + C_{2}^{\mu}) \mu_{x} + C_{2}^{\mu} (\mu_{2}^{(x)} + \mu_{3}^{(x)}) \Big] \overline{\Delta x}$$
(435)

Wzór (435) opisuje czysty stan naprężenia momentowego niepochodzący od oddziaływań mechanicznych między atomami, wywołany jedynie działaniem zewnętrznego pola magnetycznego. Podobnie, jeżeli pole magnetyczne jest wewnętrzne $B^{\text{spin-orbit}}$, to możemy mówić o naprężeniach momentowych własnych w materiałach, w których ruch orbitalny atomów nie jest wygaszony.

Gdy pole magnetyczne zewnętrzne jest jednorodne: $B_1 = B_2 = B_3 = B$, składowe tensora naprężenia momentowego w kierunkach głównych wynoszą: $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu$, oraz jeżeli materiał nie wykazuje naturalnej dwójłomności obrotowej, a = 0, to prześwietlając model w kierunku *x*, zapiszemy:

$$\Gamma^{\text{Faraday}} = \frac{\pi (C_1^{\mu} + 3C_2^{\mu})\Delta x}{\lambda n_o} \mu$$
(436)

Chcąc otrzymać obciążenie mechaniczne równoważące zewnętrzne pole magnetyczne, tak aby otrzymać stan naprężenia momentowego identyczny jak w równaniu (436), porównamy wzór (436) i (182) i wobec tego, że $\mu \equiv m_h^{\text{couple}}$ otrzymamy poszukiwaną wartość obciążenia dla stanu hydrostatycznego:

$$p = \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{kT}{\rho^2 \langle P \rangle} \frac{\lambda n_o}{\pi (C_1^{\mu} + 3C_2^{\mu}) \overline{\Delta x}} \Gamma^{\text{Faraday}}$$
(437)

12. Siła Lorentza w ośrodku Cosseratów

Ruch precesyjny elektronu w polu oddziaływań mechanicznych (rys. 36) prowadzi do powstania dodatkowego prądu orbitalnego:

$$i^{\text{couple}} = \frac{e}{2\pi} \omega^{\text{couple}}$$
(438)

który łącznie z polem magnetycznym B^{couple} wywołuje siłę Lorentza:

$$\boldsymbol{F} = \int_{V} (\boldsymbol{j}^{\text{couple}} \times \boldsymbol{B}^{\text{couple}}) dV$$
(439)

gdzie:

 j^{couple} – gęstość prądu orbitalnego,

 B^{couple} – pole magnetyczne pochodzące od precesji wszystkich elektronów w objętości V.



Rys. 36. Powstawanie dodatkowego prądu orbitalnego na skutek oddziaływań momentowych. U^{couple} to prędkość liniowa elektronu w dodatkowym ruchu orbitalnym

Siła Lorentza powoduje wypychanie lub wciąganie elektronu względem orbit utworzonych przez ruch precesyjny.

13. Wnioski

Na podstawie opisu teoretycznego w skali atomowej oraz na podstawie wyników otrzymanych w spektrometrze EPR [55, 60–62], można zaproponować interpretację fizyczną obrotu Cosseratów na poziomie atomowym w postaci precesji orbit elektronowych/nukleonowych w polu wywołanym mechaniczną zmianą odległości pomiędzy atomami. Precesja taka powstaje w atomie o budowie niesymetrycznej ze względu na obsadzenie elektronów/nukleonów na powłokach. Jako miarę obrotu Cosseratów proponuje się kąt precesji.

Precesja powłok elektronowych/nukleonowych wywołana jest oddziaływaniem momentowym w miejscu chwilowego położenia elektronu/nukleonu. Oddziaływanie momentowe całego atomu jest sumą takich oddziaływań pochodzących od elektronów walencyjnych i nukleonów w ilości różnej od liczb magicznych.

Model powstawania obrotu Cosseratów w skali makroskopowej będzie inny ze względu na to, że wektory momentu pędu bilionów atomów wypełniających objętość makroskopową zorientowane są w przestrzeni w sposób całkowicie nieuporządkowany i sumaryczny makroskopowy moment pędu układu nieobciążonego jest równy zero. Makroskopowy moment pędu, jako suma statystyczna momentów pędu zbioru atomów, z chwilą przyłożenia obciążenia rośnie od zera do wartości odpowiadającej nowemu stanowi równowagi, kiedy energia układu osiągnie wartość minimalną. Obrót makroskopowego wektora momentu pędu na skutek oddziaływań mechanicznych nazwano w pracy polaryzacją mechaniczną.

W wyniku opisu makroskopowych własności ośrodka Cosseratów na poziomie elektronowym, zależności kwantowych i rozkładu Boltzmanna, populację atomów w polu oddziaływań mechanicznych można przedstawić w funkcji mechanicznej liczby kwantowej i wyznaczając statystyczne formuły na oddziaływania momentowe, moment pędu precesji oraz cosinus kąta precesji i porównując otrzymane wyrażenia z analogicznymi wielkościami stosowanymi w teorii niesymetrycznej sprężystości, otrzymujemy poszukiwaną interpretację fizyczną teorii Cosseratów.

Na podstawie kwantowych własności ośrodka Cosseratów można opisać zjawisko optyczne w postaci obrotowej (chiralnej) dwójłomności wymuszonej. W wyniku opisu kwantowego spinu elektronu otrzymujemy zaburzenie w polu mechanicznym w postaci dwóch wartości prędkości kątowej precesji elektronu, co powoduje, że światło przechodzące przez ośrodek Cosseratów ulega rozdzieleniu na dwie fale spolaryzowane kołowo jedną prawo- i drugą lewoskrętnie. Fale te przechodzą przez ośrodek z różnymi prędkościami proporcjonalnie do naprężeń momentowych i w wyniku interferencji otrzymujemy skręcenie azymutu polaryzacji jako miarę naprężenia momentowego. Model taki może być podstawą do pomiaru kontynualnego naprężenia momentowego metodą elastooptyczną.

W pracy rozpatrywana jest molekuła jednoatomowa i precesja takiej molekuły będzie decydować o obrotach Cosseratów.

Dla molekuły zbudowanej z wielu atomów precesja atomu będzie uzupełnieniem obrotów wynikających ze zmiany kątów (oraz inwersji) wiązań.

14. Kierunki dalszych badań

Kierunki dalszych badań będą obejmować przede wszystkim dalsze prace doświadczalne, których celem będzie potwierdzenie słuszności zaprezentowanego sposobu analizy ośrodka Cosseratów. W badaniach elastooptycznych należy potwierdzić występowanie skręcenia azymutu polaryzacji pochodzące od naprężeń momentowych. Pomiar skręcenia azymutu polaryzacji należy wykonać na modelu, w którym siłowe naprężenia quasi-główne (w elastooptyce nazywane naprężeniami optycznie czynnymi) w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku przebiegu światła są sobie równe. W efekcie przewidywany wynik doświadczenia będzie pochodził głównie od naprężeń momentowych. Model elastooptyczny spełniający takie kryterium to walec wykonany z materiału wykazującego dwójłomność wymuszoną, obciążony siłą rozciągającą (lub ściskającą) wzdłuż osi oraz prześwietlany wzdłuż osi światłem spolaryzowanym liniowo. Obserwacje przewidywanego skręcenia azymutu polaryzacji będą mogły być dokonywane zarówno w świetle przechodzącym, jak i rozproszonym. Zastosowanie elastooptycznej metody "zamrażania naprężeń" pozwoli uniknąć obecności układu obciążającego na stanowisku pomiarowym.

Prace doświadczalne w skali atomowej to przede wszystkim pomiary w spektrometrze EPR i NMR, które dowiodą udziału precesji elektronów/nukleonów w powstawaniu naprężenia momentowego.

Z punktu widzenia niniejszej pracy rozwój dynamiki molekularnej to analiza układu atomów w postaci kulek wyposażonych w wektory momentu pędu, co w pierwszej kolejności wiąże się z badaniami nad potencjałem pochodzącym od precesji atomu.

Prace teoretyczne będą dotyczyć opisu efektów mikropolarnych wg współczesnych metod mechaniki kwantowej z zastosowaniem wspomnianych modeli atomu Schrödingera, Hartreego-Focka czy też Kohna-Shama oraz wg teorii pasmowej układu elektronowego ciał stałych.

Analiza zjawisk magnetycznych towarzyszących powstawaniu naprężenia momentowego będzie polegała na rozszerzeniu tego opisu o materiały dielektryczne oraz ferromagnetyki.

Kierunki dalszych badań mogą obejmować również prace, w których opisywana byłaby precesja orbit elektronowych/nukleonowych w polu wywołanym termosprężystymi zmianami odległości międzyatomowych.

W mechanice pękania można rozpatrywać wpływ precesji orbit elektronowych na dnie szczeliny na pękanie materiału.

Przyszłe prace można podjąć również w kierunku opisu zaproponowanych tzw. czystych naprężeń momentowych, w których obroty mikropolarne otrzymuje się (bez przemieszczeń atomów) w polu magnetycznym.

Literatura

- [1] Aben H., *Integrated Photoelasticity*, McGrow-Hill International Book Company, London 1979.
- [2] Acosta V., Cowan C.L., Graham B.J., *Podstawy fizyki współczesnej*, PWN, Warszawa 1981.
- [3] Ainola L., Aben H., On Generalized Wertheim Low in Integral Photoelasticity, J. Opt. Soc. Am. A, 25, (2008), 1843-1849.
- [4] Alblas J.B., A Note on the Physical Foundation of the Theory of Multipole Stress, Arch. Mech., 28, 3, 1976, 279-298.
- [5] Allen M.P., *Introduction to Molecular Dynamics Simulation*, John von Neumann Inst. For Comput., vol. 23, 2004.
- [6] Ashcroft N.W., Mermin V.D., Fizyka ciała stałego, PWN, Warszawa 1986.
- [7] Becker R., Elastic strains and magnetic properties, Physik. Z., 33, 1932.
- [8] Białynicki-Birula I., Cieplak M., Kamiński J., Teoria kwantów. Mechanika falowa, wyd. 2, PWN, Warszawa 2001.
- [9] Bidzińska E., Wzorce ilościowe dla spektroskopii elektronowego rezonansu paramagnetycznego, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2001.
- [10] Bieńkowski A., Magnetosprężyste zjawisko Villariego w ferrytach i możliwości jego wykorzystania w budowie przetworników naprężeń i sił, Prace Naukowe Politechniki Warszawskiej, Mechanika, z. 160, Warszawa 1995.
- [11] Bohr N., Studies on the Electron Theory of Metals, Doctoral Thesis, University of Copenhagen, Copenhagen 1911.
- [12] Born M., Atomic Physics, 8th ed., Dover, New York 1989.
- [13] Born M., Wolf E., Principles of Optics, Cambridge University Press, Cambridge 1999.
- [14] Brown Jr. W. F., Theory of Magnetoelastic Effect in Ferromagnetism, J. Appl. Phys., 36, (3), P.2, 1965.
- [15] Brzezowska J., Gajewski A., *Wprowadzenie do elektrodynamiki klasycznej*, Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Kraków 2010.
- [16] Cosserat E., Cosserat F., Théorie des corps déformables, A. Hermann, Paris 1909.
- [17] Dyszlewicz J., *The Plane Problem of Asymmetric Elasticity*, Bull. Acad. Polon. Sci. Sér. Sci. Tech., 19, 10, 739, 1971.
- [18] Eringen A.C., *Theory of Micropolar Elasticity*, in Fracture Vol. 1 (edited by H. Liebowitz), Academic Press, 1968.

- [19] Finnis M., Interatomic Forces in Condensed Matter, Oxford University Press, Oxford 2003.
- [20] Forest S., Cosserat Media, in Encyclopedia of Materials: Science and Technology, Elsevier Sciences Ltd., 2001, 1715-1718.
- [21] Gilman J., *Electronic Basic of the Strength of Materials*, Cambridge University Press, Cambridge 2003.
- [22] Ginter J., *Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego*, PWN, Warszawa 1986.
- [23] Grujić P., Simonowić N., Insights from the Classical Atom, Physics Today, May 2012, 40-46.
- [24] Haken H., Wolf H.Ch., Atomy i kwanty, wprowadzenie do współczesnej spektroskopii atomowej, PWN, Warszawa 2002.
- [25] Heermann D., Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997.
- [26] Ivanov O.V., Maksimov E.G., Generalized Variational Approach to Kim-Gordon Electron Gas Theory for Ionc Crystals, Solid State Commun., 97, 1996, 163-167.
- [27] Kaczkowski Z., Applications of the Magnetostrictive and Piezomagnetic Phenomena in Radioelectronics and Metrology, VI Vedeckà Konferencja Elektrotechnickej Fakulty, Zbornik Prednàsok, Fyzika, 1992.
- [28] Kaliski S., Thermo-magneto-microelasticity, Bull. Pol. Ac.: Tech., 14, 51, 1964.
- [29] Kapkowski J., Podstawy doświadczalnej analizy naprężeń i odkształceń, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 1996.
- [30] Keller E.F, Keller J.B., *Statistical Mechanics of the Moment Stress Tensor*, The Physics of Fluida, 9, 1, 1966, 3-7.
- [31] Kelsall R.W., Hamley I.W., Geoghegan M., Nanotechnologie, PWN, Warszawa 2009.
- [32] Kittel C., Introduction to Solid State Physics, 8th ed., John Wiley & Sons, New York 2005.
- [33] Kleszczewski Z., *Fizyka kwantowa, atomowa i ciała stałego*, wyd. 2, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, Gliwice 1998.
- [34] Knauss W.N, Perspectives in Experimental Solid Mechanics, International Journal of Solid Structures, 37, (1-2), 2000, 251-266.
- [35] Kosturek R., *Teoria pasmowa własności elektronowych ciał stałych*, Otwarte zasoby edukacyjne, OPEN AGH, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie.
- [36] Krzyś W., Życzkowski M., Sprężystość i plastyczność, PWN, Warszawa 1962.
- [37] Kucaba-Piętal A., *Modelowanie mikroprzepływów na gruncie teorii płynów mikropolarnych*, Wyd. Politechniki Rzeszowskiej, Rzeszów 2004.
- [38] Lagarde A., *Static and Dynamic Photoelasticity and Caustic, Recent Development*, Springer-Verlag, New York 1987.

- [39] Lakes R., Experimental Method for Study of Cosserat Elastic Solids and Other Generalized Elastic Continua, in Continuum Models for Materials with Micro-structure, ed. H. Mühlhaus, Wiley, N.Y.Ch. 1, New York 1995.
- [40] MacLella A.G, An Exact Quantum Statistical Formulation of the Elastic Constanta of Solids, J. Phys., C17, 1984, 1-12.
- [41] Milburn C., Inżynieria kwantowa, Prószyński i S-ka, Warszawa 1999.
- [42] Nizioł J., Dynamika żyroskopów ze szczególnym uwzględnieniem żyroskopu całkującego w ujęciu deterministycznym i probabilistycznym, Zeszyty Naukowe, Mechanika, Wyd. Politechniki Krakowskiej, Kraków 1975.
- [43] Nowacki W., *Teoria niesymetrycznej sprężystości*, Polska Akademia Nauk, PWN, Warszawa 1981.
- [44] Oleś A., Metody doświadczalne fizyki ciała stałego, WNT, Warszawa 1998.
- [45] Orłoś A., Doświadczalna analiza odkształceń i naprężeń, PWN, Warszawa 1975.
- [46] Petykiewicz J., Optyka falowa, PWN, Warszawa 1986.
- [47] Phillips R., Crystal, Defects and Microstructures, Cambridge 2001.
- [48] Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa 2011.
- [49] Piszczek M., Szefer G., *Bending of the Strongly Curved Bar with Allowing Couple Stresses*, J. Ther. Appl. Mech., 2, 11, 1973, 135-141.
- [50] Raabe D., Computational Material Sciences, Wiley, 1998.
- [51] Rabi J.L., The Molecular Beam Resonance, Phys. Rev., vol. 55, 1939.
- [52] Ratajczyk F., Optyka ośrodków anizotropowych, PWN, Warszawa 1994.
- [53] Razumowskij I.A., Interference Optical Methods of Solid Mechanics, Springer, 2011.
- [54] Rychlewski J., *Elastic Eenergy Decomposition and Limit Criteria*, Engineering Transactions, 59, 2011, 31-63.
- [55] Sikoń M., Theory and Experimental Verification of Thermal Stresses in Cosserat Medium, Bull. Pol. Ac.: Tech., Vol. 57, No. 2, 2009.
- [56] Sikoń M., Nieliniowa elastooptyka, XIX Sympozjum Mechaniki Eksperymentalnej Ciała Stałego, Jachranka, 18-20 października 2000.
- [57] Sikoń M., Nanomechanika Ośrodka Cosseratów. I Atom w polu sił mechanicznych. Czasopismo Techniczne, z. 6-M, Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2003.
- [58] Sikoń M., Nanomechanika Ośrodka Cosseratów. II Kwantowy charakter naprężeń momentowych, Czasopismo Techniczne, z. 6-M, Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2003.
- [59] Sikoń M., Nanomechanika Ośrodka Cosseratów. III Prądy molekularne i zjawiska magnetyczne wywołane naprężeniami momentowymi, Czasopismo Techniczne, z. 6-M, Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2003.

- [60] Sikoń M., Quantum Analysis of the Cosserat Media with Application to Paramagnetic Resonance, Bull. Pol. Ac.: Tech., 58 (4), 2010, 699-704.
- [61] Sikoń M., Łabanowska M., Bidzinska E., Wnuk M., The Effect of the Thermal Stresses on Magnetic Resonance – Proposal for Experimental Analysis of the Cosserat Medium, Proc. Thermal Stresses, 2009, 157-160.
- [62] Sikoń M., Optical and Magnetic Phenomena as Results of the Quantum Nature of the Cosserat Medium, II National Conference of the Nano and Micro Mechanics, (49), Krasiczyn 2010.
- [63] Sikoń M., Urządzenie polaryskopowe do elastooptycznego pomiaru stanu naprężenia i odkształcenia w punkcie badanego elementu, Patent nr 176571, Urząd Patentowy Rzeczypospolitej Polskiej, 1999.
- [64] Sikoń M., Cosserat Gyrobirefringence. An Introduction to Nonsymmetrical *Photoelasticity*, Bull. Pol. Ac.: Tech., 60 (1), 2012, 89-94.
- [65] Stupnicki J., Optyczne metody badań w mechanice, Mechanika Techniczna, t. X, cz. IV, PWN, Warszawa 1984, 344-437.
- [66] Stupnicki J., Nowe obszary zastosowań i nowe metody eksperymentalne w dziedzinie mechaniki ciała stałego, XXXVII Sympozjum "Modelowanie w mechanice", 08-12 lutego 1999, Gliwice 1999.
- [67] Szczepiński W., Metody doświadczalne w mechanice ciała stałego, [w:] Mechanika techniczna, t. X, PWN, Warszawa 1984.
- [68] Szefer G., Podstawy nanomechaniki materiałów, XIX Sympozjum Mechaniki Eksperymentalnej Ciała Stałego, 18-20 października 2000, Jachranka 2000.
- [69] Szymczak H., Lachowicz H., Stress-induced Magnetic Phenomena in Metallic Glasses, IEEE Trans. Magn., 24, 1988.
- [70] Villari E., *Change of Magnetization by Tension and by Electric Current*, Ann. Phys. Chem., 126, 1865.
- [71] Voigt W., *Theoretishe Studien über die Elastizitätsverhältnisse der Kristalle*, Abh. Ges. Wiss. Göttning, 43, 1887.
- [72] Woźniak C., Discrete Elastic Cosserat Media, Arch. Mech. Stos., 25, 2, 119, 33, 1973.
- [73] Weiner J.H., Statistical Mechanics of Elasticity, John Wiley & Sons, 1983.
- [74] Wnuk M.P., Podstawy mechaniki pękania, Wydawnictwo Naukowe AKAPIT, Kraków 2008.
- [75] Xide L., Huimin X., Yilan K., Xiaoping W., *A brief review and prospect of experimental solid mechanics in China*, Acta Mechanica Solida Sinica, 23, 6, 2010, 498-548.
- [76] Żabiński W., Dyrek K., *Elektronowy rezonans paramagnetyczny*, [w:] *Metody badań minerałów i skał*, praca zbiorowa pod red. A. Bolewski, B. Żabiński, Wydawnictwa Geologiczne, Warszawa 1979.

Streszczenie

W niniejszej pracy opisano atomy o budowie niesymetrycznej w warunkach obciążenia mechanicznego. Analizę przeprowadzono na podstawie mechaniki klasycznej oraz kwantowej. Otrzymane nanoparametry przeniesiono do skali makro posługując się statystyką Boltzmanna i porównano z wielkościami znanymi w teorii sprężystości Cosseratów. W podobny sposób opisano własności magnetosprężyste Cosseratów. Na podstawie opisu klasycznego zapisano fizyczne zależności dynamiki molekularnej Cosseratów. Analiza kwantowa posłużyła do interpretacji widm rezonansowych EPR. Rozwiązania mechaniki kwantowej stanowiły również podstawę opisu własności optycznych Cosseratów w postaci obrotowej (chiralnej) dwójłomności wymuszonej. Podano sposób wyznaczenia składowych niesymetrycznego tensora naprężenia momentowego metodą elastooptyczną. Przedstawiono analogię do zjawiska Faradaya i efektu Villariego oraz opisano siłę Lorentza atomu z oddziaływaniami momentowymi.

ANALYSIS OF THE COSSERAT MEDIUM ON THE BASIS OF THE ATOMIC STRUCTURE OF MATTER

Summary

The atoms about nonsymmetrical structure under the action of the mechanical load are described in this work. The analysis is carried out on the basis of the classical mechanics and quantum mechanics. Obtained nano-parameters are transformed to macroscopic scale with apply Boltzmann statistic and are compared with parameters of the Cosserat elasticity. On the basis of the classical description physical dependences of the Cosserat molecular dynamics are written. Quantum analysis is adopted to interpretation of the EPR spectrum. Solution of the quantum mechanics make basis to description of the Cosserat optical properties in the form of the gyro-birefringence. The method of determine of components of the nonsymmetrical couple stress tensor is presented. Analogy to the Faraday phenomena and Villary effect is shown and Lorentz force of the atom with couple action is described.

ANALYSE DU MILIEU DE COSSERAT SUR LA BASE DE LA STRUCTURE ATOMIQUE DE LA MATIÈRE

Abrégé

Dans ce travail on décrit la structure non symétrique des atomes sous l'effet d'une charge mécanique. L'analyse a été menée sur la base des mécaniques quantique et classique. Les nano-paramètres obtenus ont été transformés dans l'échelle continue en utilisant la technique statistique de Boltzmann et comparés avec les paramètres de la théorie d'élasticité de Cosserat. De manière similaire on a traité des caractéristiques élasto-magnétiques de Cosserat.

Sur la base de la description classique on a décrit les dépendances physiques de la dynamique moléculaire de Cosserat. L'analyse quantique a servie à l'interprétation du spectre de résonance EPR. Les solutions de la mécanique quantique ont aussi servies de base à la description des caractéristiques optiques de Cosserat sous la forme de gyro-biréfringence. On donne la description des composantes du tenseur des efforts de torsion non symétrique par la méthode photo-élastique. On présente une analogie avec l'effet de Faraday et l'effet de Villari et on décrit la force de Lorentz dans l'atome sous l'influence d'un couple.