

Vysoká škola: Univerzita Palackého
Fakulta: Přírodovědecká
Katedra: Optiky
Školní rok: 2008/2009

Diplomová práce

Název práce:

Použití Condonových relací v řešení optické aktivity krystalů ve směru kolmém k optické ose

Autor:	Michal Baránek
Studijní program	N1701 fyzika
Obor:	optika a optoelektronika
Forma studia	prezenční
Vedoucí práce:	RNDr. Ivo Vyšín, CSc.
Datum zadání práce:	únor 2008
Datum odevzdání práce:	květen 2009

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci (Použití Condonových relací v řešení optické aktivity krystalů ve směru kolmém k optické ose) vypracoval sám, při zpracování jsem využíval pouze rad vedoucího práce a zdrojů uvedených v seznamu literatury.

Podpis autora:

Bibliografická identifikace

Autor:	Michal Baránek
Typ práce:	diplomová práce
Název práce:	Použití Condonových relací v řešení optické aktivity krystalů ve směru kolmém k optické ose
Pracoviště:	katedra optiky
Vedoucí práce:	RNDr. Ivo Vyšín, CSc.
Rok obhajoby práce:	2009
Počet stran:	44
Počet příloh:	0
Jazyk:	čeština

Abstrakt:

V této práci se zabýváme řešením optické aktivity krystalů. V minulosti byl k řešení optické aktivity krystalů úspěšně použit Chandrasekharův model dvou spřažených oscilátorů. Pomocí tohoto modelu byly odvozeny disperzní relace pro veličiny popisující optickou aktivitu ve směru optické osy a pro směr kolmý k optické ose. Ukazuje se však, že Chandrasekharovo řešení je založeno na chybě ve výpočtech. Na druhé straně, řešením modelu spřažených oscilátorů s využitím Condonových relací bylo potvrzeno, že tato chyba nemá vliv na charakter disperzních relací ve směru optické osy. Avšak pro směr kolmý k optické ose nemůžeme zatím podobné závěry učinit. Právě tato skutečnost je motivací předložené práce. V práci je řešen složitější model spřažených oscilátorů, který lépe koresponduje se skutečnou strukturou reálných krystalů, použitím Condonových relací ve směru kolmém k optické ose. Je zde dokázáno, že chyba v Chandrasekharových výpočtech nemění charakter disperzních relací jak pro směr optické osy, tak i pro směr kolmý k optické ose, vztahy se liší pouze konstantním faktorem. V práci je na příkladu atomárního krystalu teluru ukázána nesprávnost tvaru konstantního faktoru odvozeného Chandrasekharem, chyba je zde dokázána a dále diskutována.

Klíčová slova: optická aktivita, komplexní rotační polarizace, disperze rotační polarizace, kruhový dichroismus, spřažené oscilátory

Bibliographical identification

Autor: Michal Baránek
Type of thesis: diploma
Title: Usege of the Condon relation in the crystalline optical activity solution in the direction perpendicular to the optic axis
Department: department of optics
Supervisor: RNDr. Ivo Vyšín, CSc.
The year of presentation: 2009
Number of pages: 44
Number of appendices: 0
Language: czech

Abstract:

Chandrasekhar method of two coupled oscillators was successfully used for the interpretation of the crystalline optical activity in the past. The optical activity dispersion relations were obtained in the direction of the optic axis and also in the direction perpendicular to the optic axis. But Chandrasekhar solution method is based on a mistake in the calculations. This mistake does not influence on the character of dispersion relations in the direction of optic axis, which has been proved by solution of the coupled oscillators model using the Condon relations, but the similar conclusion has not been yet known for the direction perpendicular to the optic axis. For that reason, the solution of more complicated model of coupled oscillators, which better corresponds to the structure of real crystals, using the Condon relations is presented also for the direction perpendicular to the optic axis. It is proved, that in spite of the mistake in calculations the Chandrasekhar conclusion holds that the character of the dispersion relation in the directions parallel and perpendicular to the optic axis is the same and differs only by constant multiplicative factor. But in this paper derived form of this factor differs from the Chandrasekhar factor. It is shown on example of atomic crystal of tellurium that the form of Chandrasekhar factor seems to be incorrect and the mistakes in its derivation are presented.

Keywords: optical activity, optical rotatory power, optical rotatory dispersion, circular dichroism, coupled oscillators

Obsah

1. Úvod	6
1.1 Optická aktivita	6
1.2 Optická aktivita jednoosých krystalů	6
1.3 Původ optické aktivity	7
1.4 Řešení optické aktivity	8
1.5 Cíl práce	9
2. Teorie	10
2.1 Model tří spřažených oscilátorů	10
2.2 Hamiltonián soustavy tří spřažených oscilátorů v poli elektromagnetických vln	11
2.3 Určení středních hodnot výchylek oscilátorů z rovnovážných poloh	15
3. Řešení	17
3.1 Výpočet vektorů polarizace a magnetizace	17
3.2 Úprava vztahů pro vektory polarizace a magnetizace do podoby korespondující s Condonovými relacemi	28
3.3 Relace pro látkové parametry opticky aktivního krystalu, disperzní relace optické aktivity	31
4. Diskuze výsledků	33
4.1 Úprava vztahů pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus	33
4.2 Porovnání výsledků dosažených pro směr kolmý k optické ose a pro směr optické osy	34
4.3 Aplikace výsledků na atomární krystal teluru	36
4.4 Porovnání Chandrasekharových výsledků s naším řešením	39
5. Závěr	41
Literatura	43

1. Úvod

1.1 Optická aktivita

Pojmem optická aktivita je označován jev, který souvisí s rozdílnou reakcí prostředí na šíření vpravo a vlevo kruhově polarizovaných vln, na které je rozložena dopadající lineárně polarizovaná vlna. Kruhově polarizované vlny se opticky aktivním prostředím šíří různou fázovou rychlostí a mohou být také (v určitém intervalu frekvencí či vlnových délek) rozdílně absorbovány. V případě neabsorbujícího prostředí se na výstupu z látky skládají fázově posunuté kruhově polarizované vlny se stejnou amplitudou, čímž vzniká opět lineárně polarizovaná vlna, avšak se stočenou polarizační rovinou vzhledem k dopadající vlně. Závislost tohoto jevu na frekvenci či vlnové délce procházející vlny je označována jako disperze rotační polarizace. Pokud jsou však kruhově polarizované vlny také rozdílně absorbovány, skládají se na výstupu z opticky aktivního prostředí kruhově polarizované vlny s různými amplitudami. Výsledkem pak není lineárně polarizovaná vlna, ale vlna polarizovaná mírně elipticky. Tento jev je znám jako kruhový dichroismus. Rotační polarizace je v tomto případě dána pootočením hlavní osy elipsy vzhledem k rovině polarizace dopadající lineárně polarizované vlny.

Opticky aktivní prostředí tak může být charakterizováno komplexními indexy lomu \bar{n}_l a \bar{n}_r pro vlevo a vpravo kruhově polarizované vlny. S využitím těchto indexů lomu pak může být jev optické aktivity popsán komplexní rotační polarizací $\bar{\rho}$, která je definovaná vztahem

$$\bar{\rho} = \rho + i\sigma = \frac{\omega}{2c} (\bar{n}_l - \bar{n}_r) = \frac{\omega}{2c} [(n_l - n_r) + i(\kappa_l - \kappa_r)], \quad (1)$$

kde ρ je disperze rotační polarizace, σ je kruhový dichroismus, c značí rychlost světla ve vakuu a n_r , n_l , κ_r , κ_l jsou reálné a imaginární složky komplexních indexů lomu, jedná se tedy o indexy lomu a indexy absorpce prostředí pro kruhově polarizované vlny. Pro úplnost je nutno poznamenat, že disperze rotační polarizace a kruhový dichroismus jako reálná a imaginární složka jednoho jevu, souvisejícího s interakcí záření a látky, jsou vzájemně vázány Kramersovými - Kronigovými relacemi [1].

1.2 Optická aktivita jednoosých krystalů

Popsaný jev optické aktivity může být také pozorován u jednoosých opticky aktivních krystalů ve směru optické osy. V ostatních směrech je situace poněkud komplikovanější, protože se kromě optické aktivity začíná projevovat i klasický lineární dvojlom. Jev lineárního dvojlomu je obecně silnější než optická aktivita [2] a jeho projevy rostou s úhlem, který svírá uvažovaný směr šíření vln s optickou osou krystalu. Ve směrech, které nejsou totožné s optickou osou krystalu se pak šíří různými fázovými rychlostmi dvě mírně elipticky polarizované vlny se stejnou elipticitou. Hlavní osy elips jsou na sebe kolmé a splývají se směry polarizací řádné a mimořádné vlny, které by se krystalem šířily při absenci optické aktivity. V

případě neabsorbujících krystalů může být elipticita těchto vln značená e popsána vztahem [3]

$$e = \frac{-G}{\frac{1}{2}(n_2^2 - n_1^2) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(n_2^2 - n_1^2)^2 + G^2}}, \quad (2)$$

kde n_1 a n_2 jsou kořeny Fresnelovy rovnice bez zahrnutí jevu optické aktivity. Parametr G závisí na směru šíření vln krystalem, který je jednoznačně popsán směrovými kosiny s_x , s_y , s_z . Parametr G je kvadratickou funkcí těchto kosinů, tj.

$$G = g_{11}s_x^2 + g_{22}s_y^2 + g_{33}s_z^2 + 2g_{12}s_x s_y + 2g_{13}s_x s_z + 2g_{23}s_y s_z, \quad (3)$$

přičemž g_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$, jsou maticové elementy gyračního tenzoru, který popisuje optickou aktivitu krystalů. Parametr G souvisí s disperzí rotační polarizace vztahem [3]

$$\rho = \frac{2\pi G}{\lambda(n_1 + n_2)}. \quad (4)$$

Použijeme-li vztah $\delta = \frac{2\pi}{\lambda}(n_2 - n_1)$ pro fázový rozdíl vztažený na jednotku délky, způsobený samotným dvojlomem (fázový rozdíl mezi řádnou a mimořádnou vlnou), je možno definovat fázový rozdíl Δ vztažený na jednotku délky pro elipticky polarizované vlny [3]

$$\Delta = \sqrt{\left[\frac{2\pi}{\lambda}(n_2 - n_1)\right]^2 + \frac{16\pi^2 G^2}{\lambda^2(n_2 + n_1)^2}} = \sqrt{\delta^2 + 4\rho^2}. \quad (5)$$

Vztah (2) pro elipticitu vln pak může být napsán v jednodušší formě

$$e = \frac{\rho}{\delta}. \quad (6)$$

V intervalu frekvencí či vlnových délek, kde se projevuje absorpce krystalu, jsou ρ a δ obecně komplexní veličiny. Z tohoto důvodu je ve směrech, které nejsou rovnoběžné s optickou osou krystalu, možné pozorovat čtyři efekty - mimo již zmíněný lineární dvojlom také lineární dichroismus, definovaný jako imaginární složka komplexního fázového rozdílu vztaženého na jednotku délky, který souvisí s lineárním dvojlomem, disperzí rotační polarizace a kruhový dichroismus. Je zřejmé, že experimentální separace těchto jevů je velice obtížná, což je také důvodem skutečnosti, že počet experimentálních dat optické aktivity krystalů pro směry, které nejsou rovnoběžné s optickou osou, je poměrně malý. Experimentální metody pro měření disperze rotační polarizace a kruhového dichroismu i v těchto směrech se však neustále vyvíjejí [4, 5], a proto i teoretické řešení optické aktivity krystalů v těchto směrech má stále větší význam. Z teorie jednoosých krystalů je dále evidentní, že nejdůležitější z těchto směrů je směr kolmý k optické ose.

1.3 Původ optické aktivity

Optická aktivita krystalů může mít svůj původ ve dvou mechanismech. Jednak může být způsobena strukturou krystalu, kdy strukturální elementy (atomy, molekuly) jsou rozmístěny na šroubovicích, jejichž osy jsou rovnoběžné s optickou osou

krystalu [6]. Druhou možností je, že optická aktivita je důsledkem optické aktivity samotných strukturních elementů - molekul. Oba tyto příspěvky k výsledné optické aktivitě (pokud se současně vyskytují) mohou být studovány odděleně. Proto se můžeme omezit pouze na studium optické aktivity, která souvisí se strukturou krystalu. Tento typ optické aktivity vyplývá z prostorové grupy symetrie krystalu. Z tohoto pohledu jsou pro nás nejdůležitější grupy symetrie D_3^4 a D_3^6 , ke kterým patří nejvýznamnější opticky aktivní krystaly jako α - křemen (označovaný za etalon optické aktivity), atomární krystaly jako telur nebo selen a dále kafr, rumělka či benzil.

1.4 Řešení optické aktivity

Z metod umožňujících odvození disperzních relací pro veličiny popisující optickou aktivitu krystalického původu ve směru kolmém k optické ose stojí za zmínění teorie excitonů [7] nebo řešení modelu dvou spřažených oscilátorů [8, 9, 10]. Modely spřažených oscilátorů poskytují obecnější výsledky než jiné metody, mají tu výhodu, že je možné relativně jednoduše vytvořit a vyřešit model, který koresponduje se strukturou reálného krystalu a pomocí vazeb mezi oscilátory zahrnout do tohoto modelu chemické vazby působící v reálném prostředí. Tímto způsobem je možné získat specifické disperzní relace pro konkrétní grupy symetrie krystalů. Řešení složitějších modelů spřažených oscilátorů, které lépe korespondují se skutečnou strukturou krystalu než základní model dvou spřažených oscilátorů, umožnily lepší popis disperze rotační polarizace teluru či bezilu [11, 12, 13] ve směru optické osy. Dá se tedy předpokládat, že tyto složitější modely upřesní řešení jednodušších modelů také ve směru kolmém k optické ose.

Na tomto místě lze připomenout, že i moderní a velmi komplikované téměř *ab initio* kvantově mechanické metody řešení disperze rotační polarizace krystalického původu [14, 15] stále využívají výsledky nejjednoduššího modelu spřažených oscilátorů (Chandrasekhara modelu dvou spřažených oscilátorů [8]) k ověřování správnosti získaných výsledků. Tyto metody byly použity k popisu disperze rotační polarizace α - křemene a trigonálního selenu mimo oblasti dichroických frekvencí. Avšak tyto výsledky se od experimentálních hodnot zatím poměrně liší (asi o 30% v případě α -křemene a asi o 50 % v případě selenu [15]). Na druhé straně, poměr komponent gyračního tenzoru g_{11}/g_{33} , který je součástí řešení těchto prací, odpovídá experimentálním datům pro tyto krystaly.

Chandrasekhar pomocí modelu dvou spřažených oscilátorů odvodil disperzní relaci pro rotační polarizaci ve směru optické osy a ve směru kolmém k optické ose mimo oblast dichroických frekvencí [8]. Tvar těchto relací

$$\rho(\omega) = \frac{K\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \quad (7)$$

je shodný pro oba směry šíření procházející vlny. Z toho vyplývá, že teoretická data pro disperzi rotační polarizace se pro směr optické osy a směr kolmý k optické ose liší jen konstantním faktorem K . Chandrasekhar odvodil vztah pro faktor K a výsledky úspěšně aplikoval na krystal α - křemene.

1.5 Cíl práce

Základní myšlenkou modelu spřažených oscilátorů v optické aktivitě krystalů je představa, že valenční elektrony atomů nebo molekul, které jsou součástí struktury krystalů, modelujeme lineárními harmonickými oscilátory rozmístěnými na šroubovicích. Chandrasekhar ve svém modelu dvou spřažených oscilátorů uvažoval pouze vazby mezi sousedními oscilátory na šroubovici a tyto vazby považoval za nezávislé. Tato představa je očividně zjednodušená, neboť druhý oscilátor jednoho páru je současně prvním oscilátorem následujícího páru atd. Zároveň pro mnoho praktických případů platí, že rozměry šroubovic jsou srovnatelné se vzdáleností mezi sousedními oscilátory, z toho důvodu je nutné uvažovat také vazby mezi dalšími oscilátory. K tomuto účelu použijeme složitější model spřažených oscilátorů, ve kterém zůstanou zachvány principy základního Chandrasekharova modelu. Pro případ krystalů náležících k prostorovým grupám symetrie D_3^4 a D_3^6 se jako vhodný ukázal model tří spřažených oscilátorů, v němž jsou zahrnuty všechny podstatné vazby mezi oscilátory ve struktuře krystalu [16]. Použitím tlumených oscilátorů můžeme také popsat efekt kruhového dichroismu.

Hlavní motivací k provedení této práce je však fakt, že podrobným studiem Chandrasekharova postupu bylo dokázáno, že Chandrasekharovo řešení je založeno na chybě ve výpočtech [17]. Analýzou této chyby a alternativním řešením modelu spřažených oscilátorů optické aktivity krystalického původu ve směru optické osy se zabývá práce [18]. Je v ní dokázáno, že navzdory uvedené chybě je tvar disperzních relací pro disperzi rotační polarizace odvozený Chandrasekharem správný. Naším cílem bude provést obdobné výpočty pro směr kolmý k optické ose a ověřit Chandrasekharovy výsledky také pro tento směr šíření elektromagnetické vlny.

V této práci bude řešen semiklasický model tří tlumených spřažených oscilátorů. Jak již bylo zmíněno, tento model je vhodný pro popis optické aktivity krystalového původu, pro krystaly patřící k prostorovým grupám symetrie D_3^4 a D_3^6 . Řešení je založeno na použití Condonových relací [1, 19]

$$\vec{P} = N \left[\mu_e(\omega) \vec{E} - \frac{\mu_{oa}(\omega)}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right], \quad (8)$$

$$\vec{M} = N \left[\mu_m(\omega) \vec{B} + \frac{\mu_{oa}(\omega)}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right], \quad (9)$$

kde \vec{P} a \vec{M} jsou vektory polarizace a magnetizace látky indukované procházející lineárně polarizovanou vlnou, \vec{E} a \vec{B} jsou vektory elektrické intenzity a magnetické indukce efektivního elektromagnetického pole, μ_e značí elektrickou susceptibilitu, μ_m magnetickou susceptibilitu a μ_{oa} optický rotační parametr, který má přímý vztah k obecně komplexní rotační polarizaci. N je počet jednotlivých oscilátorů v objemové jednotce opticky aktivního krystalu.

Z bližšího pohledu na vztahy (8, 9) je zřejmé, že v práci nebudeme používat jednotek SI, nýbrž systému jednotek CSG. Činíme tak z důvodu, aby bylo dosaženo lepší korespondence s dalšími pracemi zabývajícími se tématem optické aktivity.

Získané výsledky budou aplikovány na atomární krystal teluru.

2. Teorie

2.1 Model tří spřažených oscilátorů

Základní myšlenkou modelu spřažených oscilátorů v optické aktivitě krystalů je představa, že valenční elektrony atomů nebo molekul, které jsou součástí struktury krystalů, modelujeme lineárními harmonickými oscilátory rozmístěnými na šroubovicích. Tyto šroubovice lze nalézt na všech krystalech, které se vyznačují projevy optické aktivity krystalového původu [6]. Osy šroubovic jsou rovnoběžné s optickou osou krystalu. Směr optické osy krystalu ztotožníme se směrem souřadné osy z .

Každý oscilátor je popsán svou polohou (souřadnicemi své rovnovážné polohy) a složkami jednotkového vektoru (směrovými kosiny) ve směru svých vibrací. Vycházíme-li při popisu struktury krystalu od určitého oscilátoru (oscilátor č. 1 - viz obr. 1), polohu a směr vibrací následujícího oscilátoru na šroubovici (oscilátor č. 2) získáme posunutím oscilátoru č. 1 podél osy šroubovice a jeho následným pootočením kolem této osy. Posun d a úhel pootočení θ jsou dány grupou symetrie krystalu. U již zmíněných grup symetrie D_3^4 a D_3^6 je d třetinou výšky elementární buňky a θ je $\pm 120^\circ$.

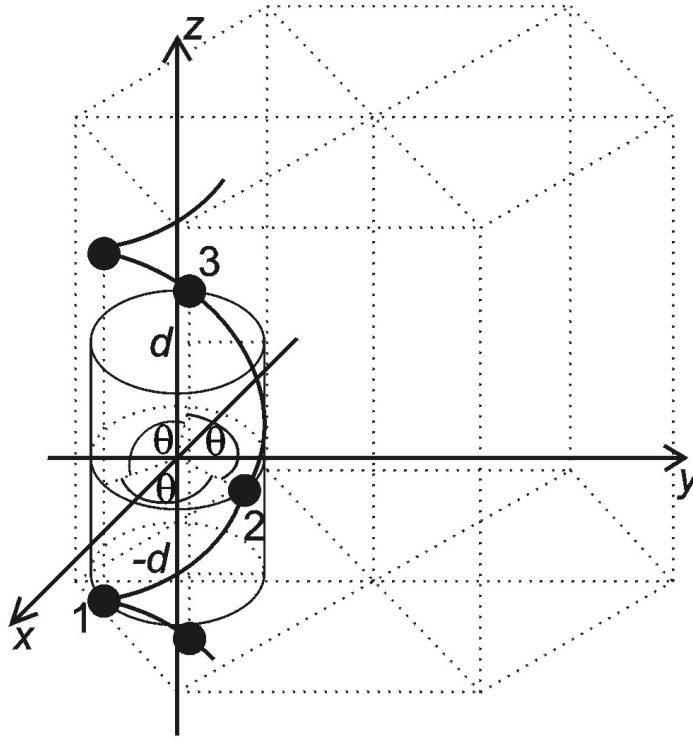
Za vázané se považují pouze oscilátory ležící na jedné šroubovici. Oscilátory ležící na různých šroubovicích se považují za nezávislé, protože vzdálenosti mezi oscilátory, které se nachází na sousedních šroubovicích jsou větší, než např. vzdálenost sousedních oscilátorů na jedné šroubovici. Předpokládá se tedy, že jednotlivé šroubovice ve struktuře krystalu přispívají k optické aktivitě nezávisle [6].

Vlastnosti modelu tří spřažených oscilátorů byly diskutovány v [16]. Zavedením vhodných konstant můžeme do modelu zahrnout jak vazby mezi sousedními oscilátory na jedné šroubovici tak i vazby mezi lichými (mezi oscilátory č. 1 a č. 3) nebo sudými oscilátory (oscilátory č. 2 a č. 4) na šroubovici s přesností na μ_1^2 , μ_2^2 , kde μ_1 a μ_2 jsou konstanty vazeb mezi sousedními oscilátory a mezi lichými či sudými oscilátory. Jelikož hodnotu těchto vazebních konstant považujeme za malou, je uvedena přesnost dostačující. Vazby mezi dalšími oscilátory nepřispívají k optické aktivitě.

Každý oscilátor je popsán polohovým vektorem své rovnovážné polohy \vec{R}_ξ a jednotkovým vektorem určujícím směr vibrací \vec{b}_ξ ; $\xi = 1, 2, 3$. Počátek zvoleného souřadnicového systému stotožníme s elektrickým středem skupiny tří spřažených oscilátorů a souřadnicová osa z odpovídá ose šroubovice. Poloměr šroubovice označíme R . Polohové vektory rovnovážných poloh jednotlivých oscilátorů můžeme psát ve tvaru

$$\begin{aligned}\vec{R}_1 &= (R_{1x}, R_{1y}, R_{1z}) = (R \cos \varphi \cos \theta + R \sin \varphi \sin \theta, \\ &\quad R \sin \varphi \cos \theta - R \cos \varphi \sin \theta, -d), \\ \vec{R}_2 &= (R_{2x}, R_{2y}, R_{2z}) = (R \cos \varphi, R \sin \varphi, 0), \\ \vec{R}_3 &= (R_{3x}, R_{3y}, R_{3z}) = (R \cos \varphi \cos \theta - R \sin \varphi \sin \theta, \\ &\quad R \sin \varphi \cos \theta + R \cos \varphi \sin \theta, d)\end{aligned}\tag{10}$$

a jednotkové vektory určující směr vibrací oscilátoru mají následující podobu:



Obr. 1

Schéma opticky aktivního krystalu, černé kuličky symbolizují jednotlivé harmonické oscilátory rozložené na šroubovici, osa z je totožná s optickou osou krystalu.

$$\begin{aligned}
 \vec{b}_1 &= (b_{1x}, b_{1y}, b_{1z}) = (\alpha \cos \theta + \beta \sin \theta, \beta \cos \theta - \alpha \sin \theta, \gamma), \\
 \vec{b}_2 &= (b_{2x}, b_{2y}, b_{2z}) = (\alpha, \beta, \gamma), \\
 \vec{b}_3 &= (b_{3x}, b_{3y}, b_{3z}) = (\alpha \cos \theta - \beta \sin \theta, \beta \cos \theta + \alpha \sin \theta, \gamma).
 \end{aligned} \tag{11}$$

2.2 Hamiltonián soustavy tří spřažených oscilátorů v poli elektromagnetických vln

Hamiltonián kvantového systému v poli procházející elektromagnetické vlny je

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}}(\vec{r}, t) \right]^2 + \hat{U}(\vec{R}), \tag{12}$$

kde $\hat{\vec{p}}$ je operátor hybnosti všech částí systému, $\hat{\vec{A}}$ operátor vektorového potenciálu elektromagnetického pole, q je elektrický náboj systému a \hat{U} je operátor poten-

ciální energie; vektor \vec{R} zahrnuje souřadnice všech komponent daného systému. Tento hamiltonián lze vyjádřit ve formě součtu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}(t), \quad (13)$$

kde \hat{H}_0 je hamiltonián systému bez započítání působení vnějšího elektromagnetického pole a \hat{H}_{int} je interakční hamiltonián systému s vnějším polem. Hamiltonián \hat{H}_0 je dán vztahem

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{R}) \quad (14)$$

a interakční hamiltonián může být v případě působení slabého elektromagnetického pole vyjádřen ve tvaru

$$\hat{H}_{int}(t) = -\frac{q}{m} \hat{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t). \quad (15)$$

Jestliže vektor elektrické intenzity rovinné monochromatické vlny je $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$ a platí $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$, může být operátor vektorového potenciálu \vec{A} zapsán v klasické formě

$$\vec{A} = -\frac{i}{\omega} \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} + \text{h.c.}, \quad (16)$$

kde zkratka h.c. značí komplexně sdruženou část.

Uvažovaný systém tří spřažených oscilátorů interaguje s lineárně polarizovanými elektromagnetickými vlnami, které se šíří např. ve směru souřadné osy x . Mimořádná vlna je polarizovaná ve směru optické osy krystalu, vektor elektrické intenzity lze tedy zapsat jako $\vec{E} = E_0 \vec{k} e^{-i\omega t}$. Vektor magnetické indukce této vlny pak je $\vec{B} = -B_0 \vec{j} e^{-i\omega t}$. Řádná vlna je polarizována ve směru osy y , vektory elektrické intenzity a magnetické indukce této vlny jsou $\vec{E} = E_0 \vec{j} e^{-i\omega t}$ a $\vec{B} = B_0 \vec{k} e^{-i\omega t}$. Výrazy $E_0 \vec{k}$, $E_0 \vec{j}$, $-B_0 \vec{j}$ a $B_0 \vec{k}$ mají význam komplexních amplitud vektoru elektrické intenzity a vektoru magnetické indukce. Šíření obou těchto vln modelovým krystalem budou v následujícím textu vyšetřována.

Pro hamiltonián soustavy tří spřažených oscilátorů v poli těchto vln potom platí

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\xi=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial r_{\xi}^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{\xi=1}^3 r_{\xi}^2 + [\mu_1 (r_1 r_2 + r_2 r_3) + \mu_2 r_1 r_3] \\ & + \left[\frac{ie}{m\omega} \sum_{\xi=1}^3 \vec{b}_{\xi} \cdot \vec{E}_0(\xi) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \hat{p}_{\xi} + \text{h.c.} \right], \end{aligned} \quad (17)$$

kde r_1 , r_2 a r_3 jsou výchylky oscilátorů z rovnovážných poloh, ω_0 je charakteristická frekvence oscilátoru, výraz $\mu_1 (r_1 r_2 + r_2 r_3) + \mu_2 r_1 r_3$ určuje potenciální energii vzájemné interakce mezi oscilátory, m je hmotnost jednoho oscilátoru, e elektrický náboj oscilátoru, \vec{b}_{ξ} je jednotkový vektor ve směru vibrací oscilátoru, $\vec{E}_0(\xi)$ je amplituda vektoru elektrické intenzity v pozici daného oscilátoru a \hat{p}_{ξ} je operátor

hybnosti jednoho oscilátoru, γ_0 je malý kladný parametr, který umožňuje adiabatickou interakci elektromagnetického pole se systémem spřažených oscilátorů v čase $t = -\infty$. Zahrnutím tohoto parametru lze formálně popsat tlumení oscilátorů, vyplývající z konečné doby života oscilátorů v excitovaných stavech [20]. Skalární součiny typu $\vec{b}_\xi \cdot \vec{E}_0(\xi) = E_\xi$, $\xi = 1, 2, 3$ mají význam projekce amplitudy vektorů elektrické intenzity lineárně polarizovaných vln do směrů vibrací oscilátorů a mohou být napsány ve formě

$$\begin{aligned} E_1 &= \vec{b}_1 \cdot \vec{E}_0(1) = \left[(\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) E_0(0) + (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right], \\ E_2 &= \vec{b}_2 \cdot \vec{E}_0(2) = \left[(\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) E_0(0) + (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right], \\ E_3 &= \vec{b}_3 \cdot \vec{E}_0(3) = \left[(\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) E_0(0) + (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

pro řádnou vlnu a ve tvaru

$$\begin{aligned} E_1 &= \vec{b}_1 \cdot \vec{E}_0(1) = \left[(\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) E_0(0) + (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right], \\ E_2 &= \vec{b}_2 \cdot \vec{E}_0(2) = \left[(\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) E_0(0) + (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right], \\ E_3 &= \vec{b}_3 \cdot \vec{E}_0(3) = \left[(\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) E_0(0) + (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i}) \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (19)$$

pro vlnu mimořádnou, kde $E_0(0)$ je velikost amplitudy vektoru elektrické intenzity v počátku souřadné soustavy, $\vec{E}_0(1)$ je amplituda vektoru elektrické intenzity v pozici prvního oscilátoru, $\vec{E}_0(2)$ v pozici druhého oscilátoru a $\vec{E}_0(3)$ v pozici třetího oscilátoru.

Nejjednodušším způsobem řešení Schroedingerovy rovnice s hamiltoniánem (17) je zavedení normálových souřadnic. V našem případě, kde uvažujeme model tří spřažených oscilátorů zavedeme normálové souřadnice vztahy

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} (r_1 + A_1 r_2 + r_3), \\ q_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (r_1 - r_3), \\ q_3 &= \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} (r_1 + A_3 r_2 + r_3), \end{aligned} \quad (20)$$

kde

$$A_1 = \frac{-\mu_2 + \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{2\mu_1},$$

$$A_3 = \frac{-\mu_2 - \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{2\mu_1}. \quad (21)$$

Po jejich dosazení hamiltonián přechází na tvar

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\eta=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial q_\eta^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{\eta=1}^3 q_\eta^2 - \frac{1}{2} (\mu_1 A_3 q_1^2 + \mu_2 q_2^2 + \mu_1 A_1 q_3^2) \\ & + \left\{ \frac{\text{ie}}{m\omega} \left[\frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} (E_1 + A_1 E_2 + E_3) \hat{p}_{q_1} + \frac{1}{\sqrt{2}} (E_1 - E_3) \hat{p}_{q_2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} (E_1 + A_3 E_2 + E_3) \hat{p}_{q_3} \right] e^{-i\omega t + \gamma_0 t} + \text{h.c.} \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

a poté lze osamostatnit normálové složky hamiltoniánu

$$\begin{aligned} \hat{H}_{q_1} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{m\omega_1^2}{2} q_1^2 \\ &+ \left[\frac{\text{ie}}{m\omega} \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} (E_1 + A_1 E_2 + E_3) \hat{p}_{q_1} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} + \text{h.c.} \right], \\ \hat{H}_{q_2} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \frac{m\omega_2^2}{2} q_2^2 \\ &+ \left[\frac{\text{ie}}{m\omega} \frac{1}{\sqrt{2}} (E_1 - E_3) \hat{p}_{q_2} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} + \text{h.c.} \right], \\ \hat{H}_{q_3} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_3^2} + \frac{m\omega_3^2}{2} q_3^2 \\ &+ \left[\frac{\text{ie}}{m\omega} \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} (E_1 + A_3 E_2 + E_3) \hat{p}_{q_3} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} + \text{h.c.} \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Vidíme, že vlastní frekvence oscilátorů ω_0 je rozštěpena na tři frekvence normálových módů vibrací, pro které platí

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 - \frac{\mu_1 A_3}{m} = \omega_0^2 + \frac{\mu_2 + \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{2m}, \\ \omega_2^2 &= \omega_0^2 - \frac{\mu_2}{m}, \\ \omega_3^2 &= \omega_0^2 - \frac{\mu_1 A_1}{m} = \omega_0^2 + \frac{\mu_2 - \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{2m}. \end{aligned} \quad (24)$$

2.3 Určení středních hodnot výchylek oscilátorů z rovnovážných poloh

Výrazy pro střední hodnoty vybraných fyzikálních veličin systému popsaného hamiltoniány (23) je nyní možné určit pomocí Kuboova teoremu [20]. Pro střední hodnoty výchylek oscilátorů z rovnovážných poloh lze v normálových souřadnicích odvodit výrazy

$$\begin{aligned}
\langle q_1 \rangle &= \frac{2e}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} (E_1 + A_1 E_2 + E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{\omega_{1_{k_0}} |\langle 1_k | q_1 | 1_0 \rangle|^2}{\omega_{1_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega}, \\
\langle q_2 \rangle &= \frac{2e}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} (E_1 - E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{\omega_{2_{k_0}} |\langle 2_k | q_2 | 2_0 \rangle|^2}{\omega_{2_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega}, \\
\langle q_3 \rangle &= \frac{2e}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} (E_1 + A_3 E_2 + E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{\omega_{3_{k_0}} |\langle 3_k | q_3 | 3_0 \rangle|^2}{\omega_{3_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega},
\end{aligned} \tag{25}$$

kde sčítáme přes excitované stavy systému, $\omega_{\eta_{k_0}}$ jsou frekvence přechodu normálových módů ze základních stavů $|\eta_0\rangle$ do excitovaných stavů $|\eta_k\rangle$, $\eta = 1, 2, 3$, γ_{k_0} je tlumící konstanta.

Dále zavedeme veličinu nazvanou síla oscilátoru

$$f_{q_{\eta_{k_0}}} = \frac{2m\omega_{\eta_{k_0}} |\langle \eta_k | q_\eta | \eta_0 \rangle|^2}{\hbar}, \tag{26}$$

výrazy (25) poté můžeme zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}
\langle q_1 \rangle &= \frac{e}{m} \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} (E_1 + A_1 E_2 + E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{f_{q_{1_{k_0}}}}{\omega_{1_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega}, \\
\langle q_2 \rangle &= \frac{e}{m} \frac{1}{\sqrt{2}} (E_1 - E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{f_{q_{2_{k_0}}}}{\omega_{2_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega}, \\
\langle q_3 \rangle &= \frac{e}{m} \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} (E_1 + A_3 E_2 + E_3) e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \sum_k \frac{f_{q_{3_{k_0}}}}{\omega_{3_{k_0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Použijeme-li inverzní vztahy k vzorcům (20)

$$\begin{aligned}
r_1 &= \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} q_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} q_2 + \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} q_3, \\
r_2 &= \frac{A_1}{\sqrt{2 + A_1^2}} q_1 + \frac{A_3}{\sqrt{2 + A_3^2}} q_3, \\
r_3 &= \frac{1}{\sqrt{2 + A_1^2}} q_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} q_2 + \frac{1}{\sqrt{2 + A_3^2}} q_3,
\end{aligned} \tag{28}$$

dostaneme výrazy pro střední hodnoty výchylek jednotlivých oscilátorů z rovnovážných poloh v původních souřadnicích

$$\begin{aligned}
\langle r_1 \rangle &= \frac{e}{m} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \left[\frac{E_1 + A_1 E_2 + E_3}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&\quad + \frac{E_1 - E_3}{2} \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
&\quad \left. + \frac{E_1 + A_3 E_2 + E_3}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \\
\langle r_2 \rangle &= \frac{e}{m} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \left[\frac{A_1 (E_1 + A_1 E_2 + E_3)}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&\quad \left. + \frac{A_3 (E_1 + A_3 E_2 + E_3)}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \quad (29) \\
\langle r_3 \rangle &= \frac{e}{m} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \left[\frac{E_1 + A_1 E_2 + E_3}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&\quad - \frac{E_1 - E_3}{2} \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
&\quad \left. + \frac{E_1 + A_3 E_2 + E_3}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right].
\end{aligned}$$

Ted' již můžeme spočítat vektory polarizace a magnetizace modelového prostředí indukované procházející vlnou podle vztahů

$$\vec{P} = eN' \left\{ \sum_{\xi=1}^3 \vec{b}_{\xi} \langle r_{\xi} \rangle \right\}_{av}, \quad (30)$$

$$\vec{M} = \frac{eN'}{2c} \left\{ \sum_{\xi=1}^3 \vec{R}_{\xi} \times \vec{b}_{\xi} \langle \dot{r}_{\xi} \rangle \right\}_{av}, \quad (31)$$

kde N' je počet složených oscilátorů v objemové jednotce a index av značí, že výsledek musíme zprůměrovat vzhledem k všem možným orientacím soustavy tří spřažených oscilátorů vůči optické ose krystalu. Tento krok probereme podrobněji později. Časová závislost výchylky r je spjata pouze s exponenciálním faktorem $e^{-i\omega t}$. Potom tedy platí

$$\langle \dot{r}_{\xi} \rangle = -i\omega \langle r_{\xi} \rangle. \quad (32)$$

Získané vztahy pro vektory polarizace a magnetizace musíme uspořádat do struktury korespondující s Condonovými vztahy (8) a (9). Řešení bude provedeno pro případ řádné i mimořádné vlny, čímž také budou získány hodnoty optického rotačního parametru pro tyto vlny. Parametr optické aktivity přímo souvisí s komplexní rotační polarizací vztahem

$$\bar{\rho}(\omega) = \frac{4\pi N' \omega^2}{c^2} \mu_{oa}(\omega). \quad (33)$$

3. Řešení

3.1 Výpočet vektorů polarizace a magnetizace

Nyní můžeme výsledky (29) dosadit do vztahů (30) a (31) pro indukované vektory polarizace a magnetizace prostředí. Pro tyto vektory pak dostaneme výrazy

$$\begin{aligned}
 \vec{P} = & \frac{e^2 N'}{m} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \left\{ \vec{b}_2 E_2 \left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
 & + (\vec{b}_1 E_1 + \vec{b}_3 E_3) \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
 & + (\vec{b}_1 E_3 + \vec{b}_3 E_1) \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
 & + (\vec{b}_2 E_1 + \vec{b}_2 E_3 + \vec{b}_1 E_2 + \vec{b}_3 E_2) \\
 & \left. \times \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right\}_{av}, \tag{34}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{M} = & -\frac{i\omega e^2 N'}{2cm} e^{-i\omega t + \gamma_0 t} \left\{ (\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) E_2 \right. \\
 & \times \left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
 & + [(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) E_1 + (\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) E_3] \\
 & \times \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
 & + [(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) E_3 + (\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) E_1] \\
 & \times \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
 & + [(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) E_1 + (\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) E_3 + (\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) E_2 + (\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) E_2] \\
 & \left. \times \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right\}_{av}. \tag{35}
 \end{aligned}$$

Získané výsledky musí být zprůměrovány vzhledem ke všem možným orientacím skupiny sprzęžených oscilátorů vzhledem k optické ose krystalu. Na základě

rozboru vztahů (34), (35) je zřejmé, že musí být zprůměrovány součiny typu $\vec{b}_n (\vec{b}_m \cdot \vec{j})$, $\vec{b}_n (\vec{b}_m \cdot \vec{j}) (\vec{R}_m \cdot \vec{i})$, $\vec{b}_n (\vec{b}_m \cdot \vec{k})$, $\vec{b}_n (\vec{b}_m \cdot \vec{k}) (\vec{R}_m \cdot \vec{i})$, $(\vec{R}_n \times \vec{b}_n) (\vec{b}_m \cdot \vec{j})$, $(\vec{R}_n \times \vec{b}_n) (\vec{b}_m \cdot \vec{k})$, $(\vec{R}_n \times \vec{b}_n) (\vec{b}_m \cdot \vec{j}) (\vec{R}_m \cdot \vec{i})$, $(\vec{R}_n \times \vec{b}_n) (\vec{b}_m \cdot \vec{k}) (\vec{R}_m \cdot \vec{i})$, kde $n, m = 1, 2, 3$.

Postup zprůměrování bude nastíněn na součinu $\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})$, který můžeme rozepsat následujícím způsobem

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) &= (\vec{b}_1 \cdot \vec{i}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) \vec{i} + (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) \vec{j} \\ &\quad + (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i}) \vec{k}. \end{aligned} \quad (36)$$

Ke zprůměrování bude použito ortogonální transformační matice rotace kolem osy z

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Řádky a sloupce matice T jsou složky ortogonálních jednotkových vektorů. U krystalů s grupou symetrie D_3^4 a D_3^6 může úhel φ nabývat hodnot, které jsou násobky hodnoty 120° . Pro zprůměrované hodnoty prvků matice T potom platí

$$\begin{aligned} \{a_{ii}a_{jj}\}_{av} &= -\{a_{ij}a_{ji}\}_{av} = \{\cos^2 \varphi\}_{av} = \{\sin^2 \varphi\}_{av} = \frac{1}{2}, \\ \{a_{ii}a_{ij}\}_{av} &= \{a_{ii}a_{ji}\}_{av} = \{\pm \sin \varphi \cos \varphi\}_{av} = 0, \\ \{a_{ii}^2\}_{av} &= \{a_{ij}^2\}_{av} = \{\cos^2 \varphi\}_{av} = \{\sin^2 \varphi\}_{av} = \frac{1}{2}, \\ \{a_{ii}\}_{av} &= \{a_{ij}\}_{av} = \{\cos \varphi\}_{av} = \{\pm \sin \varphi\}_{av} = 0 \\ \{a_{ii}^3\}_{av} &= \{a_{ij}^3\}_{av} = \{a_{ii}^2a_{jj}\}_{av} = \{a_{ii}^2a_{ij}\}_{av} = \{a_{ii}^2a_{ji}\}_{av} \\ &= \{a_{ij}^2a_{ii}\}_{av} = \{a_{ij}^2a_{jj}\}_{av} = \{a_{ij}^2a_{ji}\}_{av} = \{a_{ii}a_{ij}a_{ji}\}_{av} \\ &= \{a_{ii}a_{jj}a_{ij}\}_{av} = \{\cos^3 \varphi\}_{av} = \{\pm \sin^3 \varphi\}_{av} = \{\pm \cos^2 \varphi \sin \varphi\}_{av} \\ &= \{\pm \sin^2 \varphi \cos \varphi\}_{av} = 0; \quad i, j = 1, 2; \quad i \neq j. \end{aligned} \quad (38)$$

Zprůměrované hodnoty složek vektoru na pravé straně rovnice (36) vyjádříme ve tvaru

$$\begin{aligned} \{(\vec{b}_1 \cdot \vec{i}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{(a_{11}b_{1x} + a_{12}b_{1y}) (a_{21}b_{2x} + a_{22}b_{2y}) \\ &\quad \times (a_{11}R_{2x} + a_{12}R_{2y})\}_{av}, \\ \{(\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{(a_{21}b_{1x} + a_{22}b_{1y}) (a_{21}b_{2x} + a_{22}b_{2y}) \\ &\quad \times (a_{11}R_{2x} + a_{12}R_{2y})\}_{av}, \\ \{(\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{b_{1z} (a_{21}b_{2x} + a_{22}b_{2y}) (a_{11}R_{2x} + a_{12}R_{2y})\}_{av}. \end{aligned} \quad (39)$$

Výrazy (39) následně převedeme do podoby

$$\begin{aligned}
\{(\vec{b}_1 \cdot \vec{i}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{a_{11}a_{12}a_{21}b_{1x}b_{2x}R_{2y} + a_{11}a_{12}a_{21}b_{1y}b_{2x}R_{2x} \\
&\quad + a_{11}a_{22}a_{12}b_{1y}b_{2y}R_{2x} + a_{11}a_{22}a_{12}b_{1x}b_{2y}R_{2y} \\
&\quad + a_{11}^2a_{22}b_{1x}b_{2y}R_{2x} + a_{11}^2a_{21}b_{1x}b_{2x}R_{2x} \\
&\quad + a_{12}^2a_{22}b_{1y}b_{2y}R_{2y} + a_{12}^2a_{21}b_{1y}b_{2x}R_{2y}\}_{av}, \\
\{(\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{a_{11}a_{22}a_{21}b_{1x}b_{2y}R_{2x} + a_{11}a_{22}a_{21}b_{1y}b_{2x}R_{2x} \\
&\quad + a_{12}a_{21}a_{22}b_{1x}b_{2y}R_{2y} + a_{12}a_{21}a_{22}b_{1y}b_{2x}R_{2y} \\
&\quad + a_{21}^2a_{11}b_{1x}b_{2x}R_{2x} + a_{21}^2a_{12}b_{1x}b_{2x}R_{2y} \\
&\quad + a_{22}^2a_{11}b_{1y}b_{2y}R_{2x} + a_{22}^2a_{12}b_{1y}b_{2y}R_{2y}\}_{av}, \quad (40) \\
\{(\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \{a_{21}a_{11}b_{1z}b_{2x}R_{2x} + a_{21}a_{12}b_{1z}b_{2x}R_{2y} \\
&\quad + a_{22}a_{11}b_{1z}b_{2y}R_{2x} + a_{22}a_{12}b_{1z}b_{2y}R_{2y}\}_{av}.
\end{aligned}$$

Použijeme-li vlastností prvků transformační matice (38) k úpravě vztahů (40), tak pro zprůměrovanou hodnotu součinu $\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})$ dostaneme

$$\{\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} = \frac{1}{2} (b_{1z}b_{2y}R_{2x} - b_{1z}b_{2x}R_{2y}) \vec{k}. \quad (41)$$

Obdobným způsobem postupujeme i případech ostatních výpočtů, zprůměrované hodnoty jednotlivých výrazů pak jsou

$$\begin{aligned}
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1x}^2 + b_{1y}^2) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2x}^2 + b_{2y}^2) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3x}^2 + b_{3y}^2) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1x}b_{2y} - b_{1y}b_{2x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{1x}b_{2x} + b_{1y}b_{2y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1x}b_{3y} - b_{1y}b_{3x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{1x}b_{3x} + b_{1y}b_{3y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2x}b_{1y} - b_{2y}b_{1x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{2x}b_{1x} + b_{2y}b_{1y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2x}b_{3y} - b_{2y}b_{3x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{2x}b_{3x} + b_{2y}b_{3y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3x}b_{1y} - b_{3y}b_{1x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{3x}b_{1x} + b_{3y}b_{1y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3x}b_{2y} - b_{3y}b_{2x}) \vec{i} + \frac{1}{2} (b_{3x}b_{2x} + b_{3y}b_{2y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{1z}^2 \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{2z}^2 \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{3z}^2 \vec{k}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{1z}b_{2z} \vec{k},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{1z} b_{3z} \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{2z} b_{1z} \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{2z} b_{3z} \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{3z} b_{1z} \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= b_{3z} b_{2z} \vec{k},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{1y} R_{1x} - b_{1z} b_{1x} R_{1y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{2y} R_{2x} - b_{2z} b_{2x} R_{2y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{3y} R_{3x} - b_{3z} b_{3x} R_{3y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{2y} R_{2x} - b_{1z} b_{2x} R_{2y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{3y} R_{3x} - b_{1z} b_{3x} R_{3y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{1y} R_{1x} - b_{2z} b_{1x} R_{1y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{3y} R_{3x} - b_{2z} b_{3x} R_{3y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{1y} R_{1x} - b_{3z} b_{1x} R_{1y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{2y} R_{2x} - b_{3z} b_{2x} R_{2y}) \vec{k}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{1x} R_{1x} + b_{1z} b_{1y} R_{1y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{1z} b_{1y} R_{1x} - b_{1z} b_{1x} R_{1y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{2x} R_{2x} + b_{2z} b_{2y} R_{2y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{2z} b_{2y} R_{2x} - b_{2z} b_{2x} R_{2y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{3x} R_{3x} + b_{3z} b_{3y} R_{3y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3z} b_{3y} R_{3x} - b_{3z} b_{3x} R_{3y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{1x} R_{2x} + b_{2z} b_{1y} R_{2y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{2z} b_{1y} R_{2x} - b_{2z} b_{1x} R_{2y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_1 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{1x} R_{3x} + b_{3z} b_{1y} R_{3y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3z} b_{1y} R_{3x} - b_{3z} b_{1x} R_{3y}) \vec{j},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{2x} R_{1x} + b_{1z} b_{2y} R_{1y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{1z} b_{2y} R_{1x} - b_{1z} b_{2x} R_{1y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_2 (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3z} b_{2x} R_{3x} + b_{3z} b_{2y} R_{3y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3z} b_{2y} R_{3x} - b_{3z} b_{2x} R_{3y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z} b_{3x} R_{1x} + b_{1z} b_{3y} R_{1y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{1z} b_{3y} R_{1x} - b_{1z} b_{3x} R_{1y}) \vec{j}, \\
\{\vec{b}_3 (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z} b_{3x} R_{2x} + b_{2z} b_{3y} R_{2y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{2z} b_{3y} R_{2x} - b_{2z} b_{3x} R_{2y}) \vec{j}, \tag{42} \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1y} b_{1z} R_{1y} + b_{1x} b_{1z} R_{1x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{1x} b_{1z} R_{1y} - b_{1y} b_{1z} R_{1x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2y} b_{2z} R_{2y} + b_{2x} b_{2z} R_{2x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{2x} b_{2z} R_{2y} - b_{2y} b_{2z} R_{2x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3y} b_{3z} R_{3y} + b_{3x} b_{3z} R_{3x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3x} b_{3z} R_{3y} - b_{3y} b_{3z} R_{3x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2y} b_{1z} R_{1y} + b_{2x} b_{1z} R_{1x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{2x} b_{1z} R_{1y} - b_{2y} b_{1z} R_{1x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3y} b_{1z} R_{1y} + b_{3x} b_{1z} R_{1x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3x} b_{1z} R_{1y} - b_{3y} b_{1z} R_{1x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1y} b_{2z} R_{2y} + b_{1x} b_{2z} R_{2x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{1x} b_{2z} R_{2y} - b_{1y} b_{2z} R_{2x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3y} b_{2z} R_{2y} + b_{3x} b_{2z} R_{2x}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (b_{3x} b_{2z} R_{2y} - b_{3y} b_{2z} R_{2x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1y} b_{3z} R_{3y} + b_{1x} b_{3z} R_{3x}) \vec{i}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} (b_{1x}b_{3z}R_{3y} - b_{1y}b_{3z}R_{3x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2y}b_{3z}R_{3y} + b_{2x}b_{3z}R_{3x}) \vec{i} \\
& + \frac{1}{2} (b_{2x}b_{3z}R_{3y} - b_{2y}b_{3z}R_{3x}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{1z}b_{1y}R_{1x} - b_{1z}b_{1x}R_{1y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{2z}b_{2y}R_{2x} - b_{2z}b_{2x}R_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{3z}b_{3y}R_{3x} - b_{3z}b_{3x}R_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{2z}b_{1y}R_{1x} - b_{2z}b_{1x}R_{1y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{3z}b_{1y}R_{1x} - b_{3z}b_{1x}R_{1y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{1z}b_{2y}R_{2x} - b_{1z}b_{2x}R_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{3z}b_{2y}R_{2x} - b_{3z}b_{2x}R_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{1z}b_{3y}R_{3x} - b_{1z}b_{3x}R_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k})\}_{av} &= (b_{2z}b_{3y}R_{3x} - b_{2z}b_{3x}R_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1x}^2 R_{1y}^2 + b_{1y}^2 R_{1x}^2 - 2b_{1x}b_{1y}R_{1x}R_{1y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2x}^2 R_{2y}^2 + b_{2y}^2 R_{2x}^2 - 2b_{2x}b_{2y}R_{2x}R_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{3x}^2 R_{3y}^2 + b_{3y}^2 R_{3x}^2 - 2b_{3x}b_{3y}R_{3x}R_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{1x}R_{2x}b_{1y}b_{2y} + R_{1y}R_{2y}b_{1x}b_{2x} \\
& - R_{1x}R_{2y}b_{1y}b_{2x} - R_{1y}R_{2x}b_{1x}b_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{1x}R_{3x}b_{1y}b_{3y} + R_{1y}R_{3y}b_{1x}b_{3x} \\
& - R_{1x}R_{3y}b_{1y}b_{3x} - R_{1y}R_{3x}b_{1x}b_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{1x}R_{2x}b_{1y}b_{2y} + R_{1y}R_{2y}b_{1x}b_{2x} \\
& - R_{1x}R_{2y}b_{1y}b_{2x} - R_{1y}R_{2x}b_{1x}b_{2y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_3 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{2x}R_{3x}b_{2y}b_{3y} + R_{2y}R_{3y}b_{2x}b_{3x} \\
& - R_{2x}R_{3y}b_{2y}b_{3x} - R_{2y}R_{3x}b_{2x}b_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_1 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{1x}R_{3x}b_{1y}b_{3y} + R_{1y}R_{3y}b_{1x}b_{3x} \\
& - R_{1x}R_{3y}b_{1y}b_{3x} - R_{1y}R_{3x}b_{1x}b_{3y}) \vec{k}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_2 \cdot \vec{j}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (R_{2x}R_{3x}b_{2y}b_{3y} + R_{2y}R_{3y}b_{2x}b_{3x}
\end{aligned}$$

$$-R_{2x}R_{3y}b_{2y}b_{3x} - R_{2y}R_{3x}b_{2x}b_{3y}) \vec{k},$$

$$\begin{aligned}
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (-b_{1z}^2 R_{1x}^2 - b_{1z}^2 R_{1y}^2) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (-b_{2z}^2 R_{2x}^2 - b_{2z}^2 R_{2y}^2) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (-b_{3z}^2 R_{3x}^2 - b_{3z}^2 R_{3y}^2) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z}b_{2z}R_{1y}R_{2x} - b_{1z}b_{2z}R_{1x}R_{2y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{1z}b_{2z}R_{1x}R_{2x} - b_{1z}b_{2z}R_{1y}R_{2y}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_1 \times \vec{b}_1) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z}b_{3z}R_{1y}R_{3x} - b_{1z}b_{3z}R_{1x}R_{3y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{1z}b_{3z}R_{1x}R_{3x} - b_{1z}b_{3z}R_{1y}R_{3y}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z}b_{2z}R_{2y}R_{1x} - b_{1z}b_{2z}R_{2x}R_{1y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{1z}b_{2z}R_{1x}R_{2x} - b_{1z}b_{2z}R_{1y}R_{2y}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_2 \times \vec{b}_2) (\vec{b}_3 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_3 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z}b_{3z}R_{2y}R_{3x} - b_{2z}b_{3z}R_{2x}R_{3y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{2z}b_{3z}R_{2x}R_{3x} - b_{2z}b_{3z}R_{2y}R_{3y}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_1 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_1 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{1z}b_{3z}R_{3y}R_{1x} - b_{1z}b_{3z}R_{3x}R_{1y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{1z}b_{3z}R_{1x}R_{3x} - b_{1z}b_{3z}R_{1y}R_{3y}) \vec{j}, \\
\{(\vec{R}_3 \times \vec{b}_3) (\vec{b}_2 \cdot \vec{k}) (\vec{R}_2 \cdot \vec{i})\}_{av} &= \frac{1}{2} (b_{2z}b_{3z}R_{3y}R_{2x} - b_{2z}b_{3z}R_{3x}R_{2y}) \vec{i} \\
&\quad + \frac{1}{2} (-b_{2z}b_{3z}R_{2x}R_{3x} - b_{2z}b_{3z}R_{2y}R_{3y}) \vec{j}. \quad (43)
\end{aligned}$$

Vztahy (34), (35) pro vektory \vec{P} a \vec{M} potom můžeme převést do podoby

$$\begin{aligned}
\vec{P}_y &= \frac{N'e^2}{m} E_0(0) e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{k0}}}{\omega_{1_{k0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{k0}}}{\omega_{3_{k0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
&\quad \times \frac{1}{2} (b_{2x}^2 + b_{2y}^2) \\
&\quad + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{k0}}}{\omega_{1_{k0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{k0}}}{\omega_{2_{k0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{k0}}}{\omega_{3_{k0}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
&\quad \times \frac{1}{2} (b_{1x}^2 + b_{1y}^2 + b_{3x}^2 + b_{3y}^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} - \sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} \right) \\
& \times (b_{3x}b_{1x} + b_{3y}b_{1y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1x}b_{2x} + b_{1y}b_{2y} + b_{2x}b_{3x} + b_{2y}b_{3y}) \Big] \vec{j} \\
& + \frac{N'e^2}{2m} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2z}b_{2y}R_{2x} - b_{2z}b_{2x}R_{2y}) \\
& + \left(\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{1y}R_{1x} - b_{1z}b_{1x}R_{1y} + b_{3z}b_{3y}R_{3x} - b_{3z}b_{3x}R_{3y}) \\
& + \left(\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} - \sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{3y}R_{3x} - b_{1z}b_{3x}R_{3y} + b_{3z}b_{1y}R_{1x} - b_{3z}b_{1x}R_{1y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{2y}R_{2x} - b_{1z}b_{2x}R_{2y} + b_{2z}b_{1y}R_{1x} - b_{2z}b_{1x}R_{1y} \\
& \left. + b_{2z}b_{3y}R_{3x} - b_{2z}b_{3x}R_{3y} + b_{3z}b_{2y}R_{2x} - b_{3z}b_{2x}R_{2y}) \right] \vec{k}, \tag{44}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{P}_z = & \frac{N'e^2}{2m} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2z}b_{2y}R_{2x} - b_{2z}b_{2x}R_{2y}) \\
& + \left(\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{1y}R_{1x} - b_{1z}b_{1x}R_{1y} + b_{3z}b_{3y}R_{3x} - b_{3z}b_{3x}R_{3y}) \\
& + \left(\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} - \sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} + \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega} \right) \\
& \times (b_{3z}b_{1y}R_{3x} - b_{3z}b_{1x}R_{3y} + b_{1z}b_{3y}R_{1x} - b_{1z}b_{3x}R_{1y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{2z}b_{1y}R_{2x} - b_{2z}b_{1x}R_{2y} + b_{1z}b_{2y}R_{1x} - b_{1z}b_{2x}R_{1y}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + b_{3z}b_{2y}R_{3x} - b_{3z}b_{2x}R_{3y} + b_{2z}b_{3y}R_{2x} - b_{2z}b_{3x}R_{2y} \Big] \vec{j} \\
& + \frac{N'e^2}{m} E_0(0) e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) b_{2z}^2 \right. \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) (b_{1z}^2 + b_{3z}^2) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) 2b_{1z}b_{3z} \\
& \left. + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) (2b_{1z}b_{2z} + 2b_{2z}b_{3z}) \right] \vec{k}, (45)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_y = & -\frac{i\omega N'e^2}{4cm} E_0(0) e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2x}b_{2z}R_{2y} - b_{2y}b_{2z}R_{2x}) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1x}b_{1z}R_{1y} - b_{1y}b_{1z}R_{1x} + b_{3x}b_{3z}R_{3y} - b_{3y}b_{3z}R_{3x}) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{3x}b_{1z}R_{1y} - b_{3y}b_{1z}R_{1x} + b_{1x}b_{3z}R_{3y} - b_{1y}b_{3z}R_{3x}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{2x}b_{1z}R_{1y} - b_{2y}b_{1z}R_{1x} + b_{1x}b_{2z}R_{2y} - b_{1y}b_{2z}R_{2x} \\
& + b_{3x}b_{2z}R_{2y} - b_{3y}b_{2z}R_{2x} + b_{2x}b_{3z}R_{3y} - b_{2y}b_{3z}R_{3x}) \Big] \vec{j} \\
& - \frac{i\omega N'e^2}{4cm} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2x}^2 R_{2y}^2 + b_{2y}^2 R_{2x}^2 - 2b_{2x}b_{2y}R_{2x}R_{2y}) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1x}^2 R_{1y}^2 + b_{1y}^2 R_{1x}^2 - 2b_{1x}b_{1y}R_{1x}R_{1y} + b_{3x}^2 R_{3y}^2 + b_{3y}^2 R_{3x}^2 - 2b_{3x}b_{3y}R_{3x}R_{3y})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (R_{1x}R_{3x}b_{1y}b_{3y} + R_{1y}R_{3y}b_{1x}b_{3x} - R_{1x}R_{3y}b_{1y}b_{3x} - R_{1y}R_{3x}b_{1x}b_{3y} \\
& + R_{1x}R_{3x}b_{1y}b_{3y} + R_{1y}R_{3y}b_{1x}b_{3x} - R_{1x}R_{3y}b_{1y}b_{3x} - R_{1y}R_{3x}b_{1x}b_{3y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (R_{1x}R_{2x}b_{1y}b_{2y} + R_{1y}R_{2y}b_{1x}b_{2x} - R_{1x}R_{2y}b_{1y}b_{2x} - R_{1y}R_{2x}b_{1x}b_{2y} \\
& + R_{1x}R_{2x}b_{1y}b_{2y} + R_{1y}R_{2y}b_{1x}b_{2x} - R_{1x}R_{2y}b_{1y}b_{2x} - R_{1y}R_{2x}b_{1x}b_{2y} \\
& + R_{2x}R_{3x}b_{2y}b_{3y} + R_{2y}R_{3y}b_{2x}b_{3x} - R_{2x}R_{3y}b_{2y}b_{3x} - R_{2y}R_{3x}b_{2x}b_{3y} \\
& + R_{2x}R_{3x}b_{2y}b_{3y} + R_{2y}R_{3y}b_{2x}b_{3x} - R_{2x}R_{3y}b_{2y}b_{3x} - R_{2y}R_{3x}b_{2x}b_{3y}) \Big] \vec{k}, \quad (46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_z & = \frac{i\omega N' e^2}{4cm} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2z}^2 R_{2x}^2 + b_{2z}^2 R_{2y}^2) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1z}^2 R_{1x}^2 + b_{1z}^2 R_{1y}^2 + b_{3z}^2 R_{3x}^2 + b_{3z}^2 R_{3y}^2) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{3z}R_{1x}R_{3x} + b_{1z}b_{3z}R_{1y}R_{3y} + b_{1z}b_{3z}R_{1x}R_{3x} + b_{1z}b_{3z}R_{1y}R_{3y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{2z}R_{1x}R_{2x} + b_{1z}b_{2z}R_{1y}R_{2y} + b_{1z}b_{2z}R_{1x}R_{2x} + b_{1z}b_{2z}R_{1y}R_{2y} \\
& + b_{2z}b_{3z}R_{2x}R_{3x} + b_{2z}b_{3z}R_{2y}R_{3y} + b_{2z}b_{3z}R_{2x}R_{3x} + b_{2z}b_{3z}R_{2y}R_{3y}) \Big] \vec{j} \\
& - \frac{i\omega N' e^2}{2cm} E_0(0) e^{-i\omega t} \left[\left(\frac{A_1^2 \sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3^2 \sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \right. \\
& \times (b_{2z}b_{2y}R_{2x} - b_{2z}b_{2x}R_{2y}) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{1z}b_{1y}R_{1x} - b_{1z}b_{1x}R_{1y} + (b_{3z}b_{3y}R_{3x} - b_{3z}b_{3x}R_{3y})) \\
& + \left(\frac{\sum_k \frac{f_{q1_{ko}}}{\omega_{1_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_1^2} - \frac{\sum_k \frac{f_{q2_{ko}}}{\omega_{2_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2} + \frac{\sum_k \frac{f_{q3_{ko}}}{\omega_{3_{ko}}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{ko}\omega}}{2 + A_3^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (b_{3z}b_{1y}R_{1x} - b_{3z}b_{1x}R_{1y} + b_{1z}b_{3y}R_{3x} - b_{1z}b_{3x}R_{3y}) \\
& + \left(\frac{A_1 \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_1^2} + \frac{A_3 \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega}}{2 + A_3^2} \right) \\
& \times (b_{2z}b_{1y}R_{1x} - b_{2z}b_{1x}R_{1y} + b_{1z}b_{2y}R_{2x} - b_{1z}b_{2x}R_{2y} \\
& + b_{3z}b_{2y}R_{2x} - b_{3z}b_{2x}R_{2y} + b_{2z}b_{3y}R_{3x} - b_{2z}b_{3x}R_{3y}) \Big] \vec{k}, \tag{47}
\end{aligned}$$

dolními indexy y, z jsme označili směry polarizací řádné a mimořádné vlny ve zvoleném souřadném systému.

Dosadíme-li pak za jednotlivé složky polohových vektorů oscilátorů (10) a jednotkových vektorů ve směrech vibrací oscilátorů (11), získáme pro vektory polarizace a magnetizace výrazy

$$\begin{aligned}
\vec{P}_y &= \frac{N'e^2}{2m} E_0(0) e^{-i\omega t} (\alpha^2 + \beta^2) \left[\frac{(A_1 + 2 \cos \theta)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + 2 \sin^2 \theta \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} + \left. \frac{(A_3 + 2 \cos \theta)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{j} \\
& - \frac{N'e^2\gamma R}{2m} \cdot \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + \left. \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{k}, \tag{48}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{P}_z &= \frac{N'e^2\gamma^2}{m} E_0(0) e^{-i\omega t} \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + \left. \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{k} \\
& - \frac{N'e^2\gamma R}{2m} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& + \left. \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{j}, \tag{49}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_y &= -\frac{i\omega N'e^2\gamma R}{2mc} E_0(0) e^{-i\omega t} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \Big] \vec{j} \\
& - \frac{i\omega N' e^2 R^2}{4mc} \cdot \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi)^2 \\
& \times \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{k}, \tag{50}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_z & = \frac{i\omega N' e^2 \gamma^2 R^2}{4mc} \frac{\partial E_0(0)}{\partial x} e^{-i\omega t} \\
& \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{j} \\
& + \frac{i\omega N' e^2 \gamma R}{2mc} E_0(0) e^{-i\omega t} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{k}. \tag{51}
\end{aligned}$$

3.2 Úprava vztahů pro vektory polarizace a magnetizace do podoby korespondující s Condonovými relacemi

Jak již bylo zmíněno, pro vektor elektrické intenzity řádné vlny platí

$$\vec{E} = E_0 \vec{j} e^{-i\omega t}. \tag{52}$$

Pro časovou derivaci vektoru elektrické intenzity platí

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -i\omega \vec{E}, \tag{53}$$

z čehož vyplývá

$$E_0 \vec{j} e^{-i\omega t} = -\frac{1}{i\omega} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \tag{54}$$

Použijeme-li Maxwellovu rovnici

$$\text{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \quad (55)$$

kde

$$\text{rot}\vec{E} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & E & 0 \end{vmatrix} = \frac{\partial E}{\partial x}\vec{k}, \quad (56)$$

dostaneme

$$\frac{\partial E_0}{\partial x}\vec{k}e^{-i\omega t} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}. \quad (57)$$

Z tohoto výrazu a faktu, že časová derivace magnetické indukce se vypočítá obdobně jako u elektrické intenzity

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = -i\omega\vec{B}, \quad (58)$$

získáme poslední potřebný vztah

$$\frac{\partial E_0}{\partial x}\vec{k}e^{-i\omega t} = \frac{i\omega}{c}\vec{B}. \quad (59)$$

Stejně výpočty provedeme pro mimořádnou vlnu, čímž získáme výrazy

$$\begin{aligned} \vec{E} &= E_0\vec{k}e^{-i\omega t}, \\ E_0\vec{k}e^{-i\omega t} &= -\frac{1}{i\omega}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_0}{\partial x}\vec{j}e^{-i\omega t} &= \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_0}{\partial x}\vec{j}e^{-i\omega t} &= -\frac{i\omega}{c}\vec{B}. \end{aligned} \quad (60)$$

Použijeme-li tyto výsledky k úpravám vztahů (48), (49), (50) a (51), dostaneme

$$\begin{aligned} \vec{P}_y &= \frac{N'e^2}{2m}(\alpha^2 + \beta^2) \left[\frac{(A_1 + 2\cos\theta)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\ &\quad + 2\sin^2\theta \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\ &\quad \left. + \frac{(A_3 + 2\cos\theta)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{E} \\ &\quad + \frac{N'e^2\gamma R}{2mc}(\alpha\sin\varphi - \beta\cos\varphi) \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned}
\vec{P}_z = & \frac{N'e^2\gamma^2}{m} \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + \left. \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{E} \\
& - \frac{N'e^2\gamma R}{2mc} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (62)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_y = & \frac{\omega^2 N'e^2 R^2}{4mc^2} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi)^2 \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + \left. \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{B} \\
& + \frac{N'e^2\gamma R}{2mc} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
& \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (63)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{M}_z = & \frac{\omega^2 N'e^2\gamma^2 R^2}{4mc^2} \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k0}}}{\omega_{2k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \\
& \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \vec{B} \\
& - \frac{N'e^2\gamma R}{2mc} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k0}}}{\omega_{1k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right. \\
& \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k0}}}{\omega_{3k0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k0}\omega} \right] \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (64)
\end{aligned}$$

což jsou již vztahy vhodné pro porovnání s Condonovými relacemi (8), (9).

3.3 Relace pro látkové parametry opticky aktivního krystalu, disperzní relace optické aktivity

Elektrické susceptibility prostředí pro řádnou a mimořádnou vlnu jsou

$$\begin{aligned}
 \mu_{e_y} &= \frac{e^2}{2m} (\alpha^2 + \beta^2) \left[\frac{(A_1 + 2 \cos \theta)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad \left. + 2 \sin^2 \theta \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} + \frac{(A_3 + 2 \cos \theta)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \\
 \mu_{e_z} &= \frac{e^2 \gamma^2}{m} \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right] \quad (65)
 \end{aligned}$$

a pro magnetické susceptibility prostředí platí

$$\begin{aligned}
 \mu_{m_y} &= \frac{\omega^2 e^2 R^2}{4c^2 m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi)^2 \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \\
 \mu_{m_z} &= \frac{\omega^2 e^2 \gamma^2 R^2}{4c^2 m} \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
 &\quad \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right]. \quad (66)
 \end{aligned}$$

Nás však nejvíc zajímá parametr související s optickou aktivitou. Porovnáním s Condonovými vztahy získáme

$$\begin{aligned}
 \mu_{oa_y} &= -\frac{e^2 \gamma R}{2m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \\
 \mu_{oa_z} &= \frac{e^2 \gamma R}{2m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
 &\quad \times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
 &\quad + (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
 &\quad \left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \quad (67)
 \end{aligned}$$

vyjdeme-li ze vztahů pro indukovanou polarizaci a

$$\begin{aligned}
\mu_{oa_y} &= \frac{e^2\gamma R}{2m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \\
&\times \left[\frac{A_1^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_1 \cos \theta}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&+ (1 - \cos 2\theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
&\left. + \frac{A_3^2 + 2 + 2 \cos 2\theta + 4A_3 \cos \theta}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \\
\mu_{oa_z} &= -\frac{e^2\gamma R}{2m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) \left[\frac{(A_1 + 2)^2}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&\left. + \frac{(A_3 + 2)^2}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right], \tag{68}
\end{aligned}$$

vyjdeme-li ze vztahů pro indukovanou magnetizaci. V obou případech má konečná podoba parametru optické aktivity tvar

$$\begin{aligned}
\mu_{oa}(\omega) &= \frac{e^2\gamma R}{2m} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) (1 - \cos \theta) \\
&\times \left[-\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} \sum_k \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&+ (1 + \cos \theta) \sum_k \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
&\left. - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} \sum_k \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right]. \tag{69}
\end{aligned}$$

Ze získaného optického rotačního parametru můžeme ze vztahu (33) určit komplexní rotační polarizaci

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}(\omega) &= \frac{2N'\pi\omega^2 e^2\gamma R}{mc^2} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) (1 - \cos \theta) \\
&\times \sum_k \left[-\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} \cdot \frac{f_{q_{1k_0}}}{\omega_{1k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right. \\
&+ (1 + \cos \theta) \frac{f_{q_{2k_0}}}{\omega_{2k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \\
&\left. - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} \cdot \frac{f_{q_{3k_0}}}{\omega_{3k_0}^2 - \omega^2 - 2i\gamma_{k_0}\omega} \right]. \tag{70}
\end{aligned}$$

V případě modelu tří spřažených oscilátorů je počet jednotlivých oscilátorů v objemové jednotce $N = 2N'$, kde N' je počet složených oscilátorů v objemové jednotce [18]. Stejný výsledek byl odvozen použitím modifikovaných Rosenfeldových relací [21], tento způsob řešení spočívá v přímém výpočtu rotačních sil normálových módů vibrací [22].

4. Diskuze

4.1 Úprava vztahů pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus

Disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus získáme jako reálnou a imaginární část výsledku (70)

$$\begin{aligned} \rho(\omega) = & C' \omega^2 \sum_k \left[-\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} \cdot \frac{(\omega_{1k0}^2 - \omega^2) f_{q_{1k0}}}{(\omega_{1k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \right. \\ & + (1 + \cos \theta) \frac{(\omega_{2k0}^2 - \omega^2) f_{q_{2k0}}}{(\omega_{2k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \\ & \left. - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} \cdot \frac{(\omega_{3k0}^2 - \omega^2) f_{q_{3k0}}}{(\omega_{3k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \right], \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) = & 2C' \omega^3 \sum_k \left[-\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} \cdot \frac{\gamma_{k0} f_{q_{1k0}}}{(\omega_{1k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \right. \\ & + (1 + \cos \theta) \frac{\gamma_{k0} f_{q_{2k0}}}{(\omega_{2k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \\ & \left. - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} \cdot \frac{\gamma_{k0} f_{q_{3k0}}}{(\omega_{3k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2 \omega^2} \right], \end{aligned} \quad (72)$$

kde $C' = \frac{\pi N e^2 \gamma R}{m c^2} (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi) (1 - \cos \theta)$. Následně zavedeme nové konstanty

$$\begin{aligned} K_{k0}^{(1)'} &= -\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} f_{q_{1k0}} \\ &+ f_{q_{2k0}} (1 + \cos \theta) - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} f_{q_{3k0}}, \\ K_{k0}^{(2)'} &= \frac{\mu_1}{m} \left[-\frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} A_3 f_{q_{1k0}} + \frac{\mu_2}{\mu_1} f_{q_{2k0}} (1 + \cos \theta) \right. \\ &\left. - \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} A_1 f_{q_{3k0}} \right], \\ K_{k0}^{(3)'} &= \left(\frac{\mu_1}{m} \right)^2 \left[-\frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{2(A_1 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_1^2} A_1 f_{q_{1k0}} \right. \\ &\left. - 2f_{q_{2k0}} (1 + \cos \theta) - \frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{2(A_3 + 1 + \cos \theta)}{2 + A_3^2} A_3 f_{q_{3k0}} \right]. \end{aligned} \quad (73)$$

Nyní můžeme výsledky pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus převést do výhodnějšího tvaru. Budeme-li uvažovat pouze jednu frekvenci přechodu ω_{k0} související s přechodem ze základního do prvního excitovaného stavu,

můžeme finální vztahy napsat ve formě součtu zlomků, které ve jmenovateli obsahují rostoucí mocniny výrazu $(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2$, přičemž členy násobené μ_1^3 , μ_1^4 , μ_2^3 a μ_2^4 zanedbáme. Vztahy pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus jsou poté

$$\rho(\omega) = C' \sum_k \left\{ \frac{K_{k0}^{(1)'} \omega^2 (\omega_{k0}^2 - \omega^2)}{(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2} + \frac{K_{k0}^{(2)'} \omega^2 [(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 - 4\gamma_{k0}^2\omega^2]}{[(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2]^2} + \frac{K_{k0}^{(3)'} \omega^2 (\omega_{k0}^2 - \omega^2) [(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 - 12\gamma_{k0}^2\omega^2]}{[(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2]^3} \right\}, \quad (74)$$

$$\sigma(\omega) = 2C' \sum_k \left\{ \frac{K_{k0}^{(1)'} \gamma_{k0}\omega^3}{(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2} + \frac{2K_{k0}^{(2)'} \gamma_{k0}\omega^3 (\omega_{k0}^2 - \omega^2)}{[(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2]^2} + \frac{K_{k0}^{(3)'} \gamma_{k0}\omega^3 [3(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 - 4\gamma_{k0}^2\omega^2]}{[(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{k0}^2\omega^2]^3} \right\}. \quad (75)$$

Pokud se omezíme pouze na disperzi rotační polarizace mimo oblast dichroických frekvencí, platí přibližení $\gamma_{k0}^2\omega^2 \ll (\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2$. Disperzní relace pro disperzi rotační polarizace (74) pak nabude tvaru

$$\rho(\omega) = C' \sum_k \left[\frac{K_{k0}^{(1)'} \omega^2}{\omega_{k0}^2 - \omega^2} + \frac{K_{k0}^{(2)'} \omega^2}{(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^2} + \frac{K_{k0}^{(3)'} \omega^2}{(\omega_{k0}^2 - \omega^2)^3} \right]. \quad (76)$$

První člen na pravé straně rovnice (76) je znám jako Drudův člen, druhý je Chandrasekharův člen (7) a třetí člen je důsledek použití modelu tří sprzęžených oscilátorů.

4.2 Porovnání výsledků dosažených pro směr kolmý k optické ose a pro směr optické osy

Následující úpravy disperzních relací provedeme proto, abychom námi získané výsledky mohli porovnat s řešením pro vlnu šířící se ve směru optické osy [18]. Podíváme-li se na oba výsledky, zjistíme, že disperzní relace pro veličiny popisující optickou aktivitu se pro směr optické osy a pro směr kolmý k optické ose neliší, co se týče závislosti na frekvenci. Rozdílné jsou jen konstantní faktory vyskytující se v disperzních relacích. Z tohoto důvodu musíme tedy určit poměry $C'K_{k0}^{(1)'} / (CK_{k0}^{(1)})$, $C'K_{k0}^{(2)'} / (CK_{k0}^{(2)})$, $C'K_{k0}^{(3)'} / (CK_{k0}^{(3)})$, kde konstanty C , $K_{k0}^{(1)}$, $K_{k0}^{(2)}$ a $K_{k0}^{(3)}$ pro vlnu šířící se ve směru optické osy byly definovány v [18].

Hodnocení těchto poměrů se odvíjí od použité aproximace pro síly oscilátorů normálových módů vibrací. V klasické aproximaci jsou síly oscilátorů normálových módů stejné, platí tedy $f_{1k0} = f_{2k0} = f_{3k0} = f_{k0}$, kde f_{k0} je síla jednoduchého

oscilátoru. V tom případě, $K_{k0}^{(1)} = K_{k0}^{(1)'} = 0$ a první člen na pravé straně disperzní relace (76) odpadne. Pro ostatní poměry konstant jsou výsledky následující:

$$\begin{aligned}\frac{C'K_{k0}^{(2)'}}{CK_{k0}^{(2)}} &= \frac{2C'}{C} \cdot \frac{\mu_1 + \mu_2 (1 + \cos \theta)}{\mu_1 + 2\mu_2 \cos \theta}, \\ \frac{C'K_{k0}^{(3)'}}{CK_{k0}^{(3)}} &= \frac{2C'}{C} \cdot \frac{\mu_1 (2 + \cos \theta)}{\mu_2 + 2\mu_1 \cos \theta}.\end{aligned}\quad (77)$$

Na druhé straně, kvantově mechanická aproximace používající k výpočtům sil oscilátorů poruchovou teorii vede k rovnicím [23]

$$\frac{f_{1k0}}{\omega_{1k0}} = \frac{f_{2k0}}{\omega_{2k0}} = \frac{f_{3k0}}{\omega_{3k0}} = \frac{f_{k0}}{\omega_{k0}} \quad (78)$$

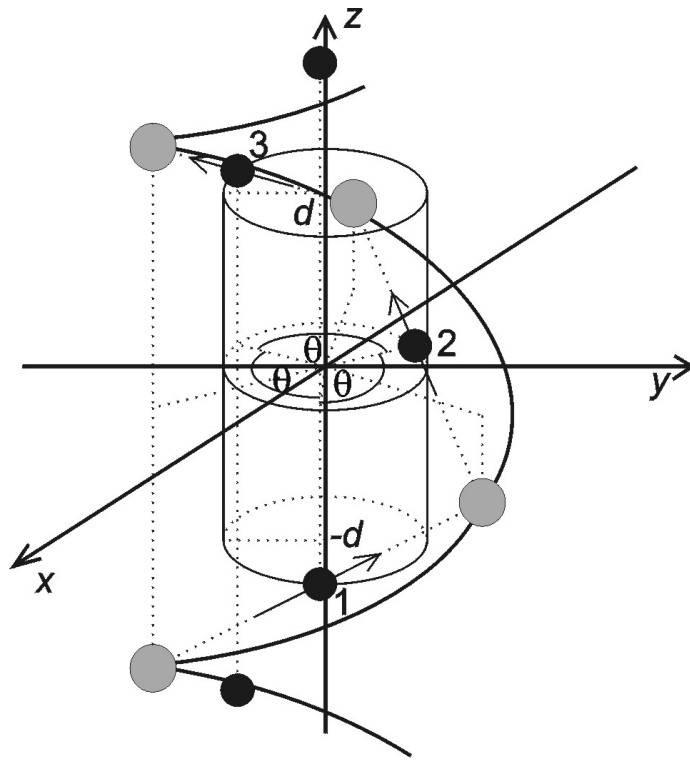
a použijeme-li relace pro frekvence normálových módů vibrací (24), tak síly oscilátorů normálových módů mohou být vypočteny takto

$$\begin{aligned}f_{1k0} &= f_{k0} \left(1 + \frac{\mu_2 + \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{4m\omega_{k0}^2} \right), \\ f_{2k0} &= f_{k0} \left(1 - \frac{\mu_2}{2m\omega_{k0}^2} \right), \\ f_{3k0} &= f_{k0} \left(1 + \frac{\mu_2 - \sqrt{\mu_2^2 + 8\mu_1^2}}{4m\omega_{k0}^2} \right).\end{aligned}\quad (79)$$

Při použití této aproximace nemusí být Drudův člen nulový, ale jeho hodnota je velmi malá. S využitím výsledků (79) získáme pro poměry konstant výrazy

$$\begin{aligned}\frac{C'K_{k0}^{(1)'}}{CK_{k0}^{(1)}} &= \frac{2C'}{C} \cdot \frac{\mu_1 + \mu_2 (1 + \cos \theta)}{\mu_1 + 2\mu_2 \cos \theta}, \\ \frac{C'K_{k0}^{(2)'}}{CK_{k0}^{(2)}} &= \frac{2C'}{C} \cdot \frac{\mu_1 + \mu_2 (1 + \cos \theta)}{\mu_1 + 2\mu_2 \cos \theta}, \\ \frac{C'K_{k0}^{(3)'}}{CK_{k0}^{(3)}} &= \frac{2C'}{C} \cdot \frac{\mu_1 (2 + \cos \theta)}{\mu_2 + 2\mu_1 \cos \theta}.\end{aligned}\quad (80)$$

Nyní je vidět, že poměry konstant nezávisí na použité aproximaci. Členy v relacích pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus obsahující konstanty $K_{k0}^{(3)}$ a $K_{k0}^{(3)'}$ se nevyskytují ve výsledcích modelu dvou spřažených oscilátorů. Tyto členy však mají význam mírné korekce vyplývající z použití modelu tří spřažených oscilátorů, proto můžeme v limitě použití modelu dvou spřažených oscilátorů potvrdit Chandrasekharovy závěry, které říkají, že vztahy pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus pro směr optické osy a pro směr kolmý k optické ose jsou shodné, co se týče závislosti na frekvenci, liší pouze konstantním členem.



Obr. 2

Znázornění krystalu teluru, šedě jsou označena atomová jádra a černě valenční elektrony reprezentované lineárními harmonickými oscilátory.

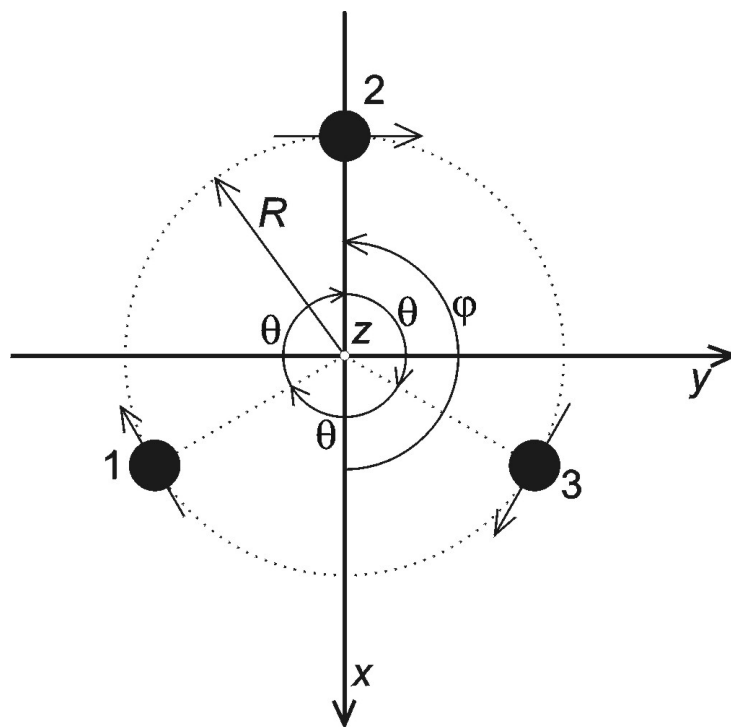
V praktických případech platí, že vazby mezi sudými nebo lichými oscilátory jsou mnohem slabší než vazby mezi sousedními oscilátory. Můžeme tedy použít přiblížení $\mu_2 \ll \mu_1$. Zmíněný konstantní faktor má potom tvar

$$\frac{\rho^\perp}{\rho^\parallel} = \frac{\sigma^\perp}{\sigma^\parallel} = \frac{C' K_{k0}^{(2)'}}{C K_{k0}^{(2)}} \approx \frac{2C'}{C} = \frac{\gamma R (1 - \cos \theta) (\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi)}{d (\alpha^2 + \beta^2) \sin \theta} \quad (81)$$

kde ρ^\perp , σ^\perp a ρ^\parallel , σ^\parallel jsou disperze rotační polarizace a kruhový dichroismus ve směru kolmém k optické ose respektivně ve směru optické osy.

4.3 Aplikace výsledků na atomární krystal teluru

Aplikujeme získané výsledky na krystal teluru. Jedná se o atomární krystal, patří k uvedeným prostorovým grupám symetrie D_3^4 a D_3^6 , tzn. že se vyskytuje v pravé i levé formě - atomy Te tvoří pravé i levé šroubovice při pohledu podél optické osy krystalu ve směru šíření světla. Směry maximálních polarizací valenčních elektronů jsou rovnoběžné se směry nejkratších spojnic mezi atomy Te na jedné šroubovici [6], jsou tedy rovnoběžné s tangentami ke šroubovicím, tvořeným atomy Te. Valenční elektrony reprezentovány lineárními harmonickými oscilátory se nachází mezi sousedními atomy Te na šroubovici, to znamená, že valenční elektrony



Obr. 3

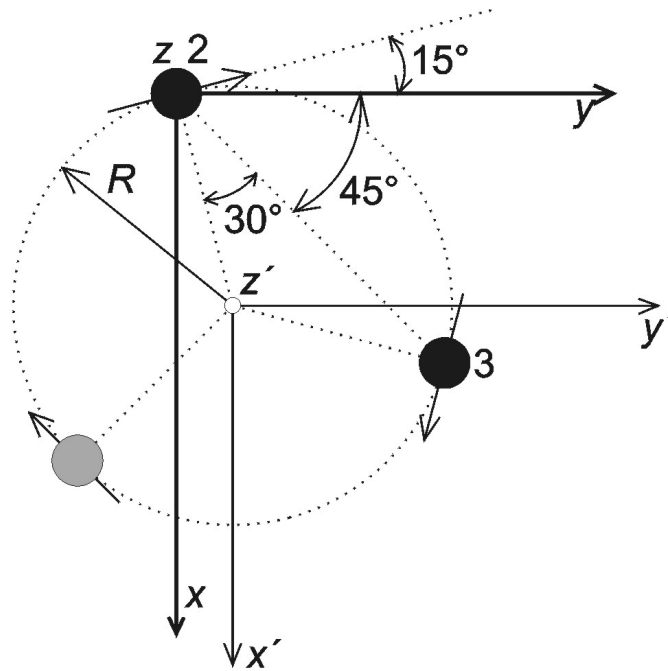
Projekce oscilátorů a směrů jejich vibrací (znázorněny šipkami) do roviny $z = 0$ v námi zvoleném uspořádání.

vytváří vlastní šroubovice se stejnou výškou, ale polovičním poloměrem oproti šroubovicím tvořeným atomovými jádry (obr. 2).

Parametry Bravaisovy mřížky a parametry elementární buňky krystalu, obsahující tři atomy Te, jsou dostatečně známy [24] - vzdálenost mezi osami dvou sousedních šroubovic je $a = 4,45 \text{ \AA}$, pro výšku elementární buňky platí $c = 5,95 \text{ \AA}$, vzdálenost mezi sousedními atomy Te na šroubovici je $2,86 \text{ \AA}$, poměr R'/a , kde R' je poloměr šroubovice tvořené atomy Te, má hodnotu $0,268$. Odtud vyplývá, že $d = c/3 = 1,9833 \text{ \AA}$, úhel mezi směrem maximální polarizace a optickou osou je $46,094^\circ$ (tj. $\gamma = 0,6935$) a $R' = 1,19 \text{ \AA}$. Omezme se v dalším rozboru pouze na levotočivou formu krystalu teluru, tj. na prostorovou grupu symetrie D_3^6 a zvolme pozice oscilátorů uvedené na obr. 3. Na tomto obrázku je znázorněna projekce rovnovážných poloh oscilátorů do roviny kolmé na optickou osu a projekce směrů jejich vibrací do této roviny. Pokud vyjdeme z tohoto uspořádání, není problém určit ostatní parametry vystupující ve vztahu (81). Pro zbývající směrové kosiny, definující směr vibrací druhého oscilátoru, vychází hodnoty $\alpha = 0$ a $\beta = 0,7205$. Pro levotočivou šroubovici platí, že $\theta = -120^\circ$, $\varphi = 180^\circ$ a $R = R'/2 = 0,595 \text{ \AA}$. Dosadíme-li tyto hodnoty do vztahu (81), dostaneme

$$\frac{\rho^\perp}{\rho^\parallel} = \frac{\sigma^\perp}{\sigma^\parallel} \approx -0,5. \quad (82)$$

Tato hodnota velmi dobře koresponduje s teoretickými závěry práce [14] pro



Obr. 4

Oscilátory v Chandrasekharově uspořádání, Chandrasekhar uvažoval dvojici spřažených oscilátorů, v obrázku jim odpovídají oscilátory 2 a 3, souřadnice, ve kterých byl proveden náš výpočet jsou označeny čárkou.

atomární krystaly. Ve zmíněné práci je počítán poměr složek gyračního tenzoru g_{11}/g_{33} . Disperze rotační polarizace je vázána se složkami gyračního tenzoru pro směry šíření vln ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy vztahy

$$\rho^{\perp} = \frac{2\pi g_{11}}{\lambda(n_0 + n_e)}, \quad \rho^{\parallel} = \frac{\pi g_{33}}{\lambda n_0}. \quad (83)$$

Te (a také Se) jsou však pozitivní jednoosé krystaly s velmi silným dvojlomem [25]. Např. pro vlnové délky v intervalu od 4 do 14 μm se hodnoty řádného indexu lomu n_o pohybují v rozmezí od 4,929 do 4,785 a hodnoty mimořádného indexu lomu n_e v rozmezí od 6,372 do 6,230. To znamená, že poměr složek gyračního tenzoru g_{11}/g_{33} bude v absolutní hodnotě asi o 15% větší, než uvedená hodnota poměru rotačních polarizací pro směr šíření vlny ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy, tedy $g_{11}/g_{33} \approx -0,5743$. Tento výsledek dobře koresponduje s výsledky Zhonga, i když je v absolutní hodnotě o něco menší. Na druhou stranu je potvrzeno, že absolutní hodnota poměru g_{11}/g_{33} je pro atomární krystaly větší než pro α - křemen.

4.4 Porovnání Chandrasekharových výsledků s naším řešením

Nyní naše řešení (81) porovnáme s Chandrasekharovými výsledky [8]. Chandrasekhar odvodil vztah pro $\rho^\perp/\rho^\parallel$ mimo oblast dichroických frekvencí, přičemž použil specifické uspořádání dvojice spřažených oscilátorů. První oscilátor uvažovaného páru se nachází v počátku souřadného systému. Souřadnice druhého oscilátoru jsou x, y, d , kde $x = y$. Projekce oscilátorů do roviny určené osami x a y je ukázána na obr. 4. Chandrasekharův vztah pro poměr disperze rotační polarizace ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy je následující:

$$\frac{\rho^\perp}{\rho^\parallel} = \frac{x [\alpha\gamma (1 - \cos \theta - \sin \theta) + \beta\gamma (1 - \cos \theta + \sin \theta)]}{d \sin \theta (\alpha^2 + \beta^2)}. \quad (84)$$

Pro případ, kdy položíme-li $\varphi = 195^\circ$, odpovídá uspořádání námi uvažovaných tří oscilátorů Chandrasekharovu uspořádání dvojice oscilátorů. V tomto případě jsou směrové kosiny druhého oscilátoru v modelu tří spřažených oscilátorů (tomuto oscilátoru odpovídá první oscilátor v Chandrasekharově modelu dvou spřažených oscilátorů) $\alpha = -0,1865$, $\beta = 0,6959$ a $\gamma = 0,6935$, $x = y = \sqrt{\frac{3}{2}}R$ a pro levotočivou šroubovici ($d > 0$) $\theta = -120^\circ$.

Použijeme-li vztah (81), dostaneme opět výsledek (82). Ale použitím Chandrasekharova vztahu (84) dojdeme k výsledku $\rho^\perp/\rho^\parallel = -8,2 \times 10^{-5}$, to by ovšem znamenalo, že disperze rotační polarizace je ve směru kolmém k optické ose téměř rovna nule. To je však pro uvažovanou strukturu vázaných oscilátorů zcela nepravděpodobné.

Bližším rozbořem Chandrasekharových výpočtů bylo dokázáno, že chyba je v použitém souřadném systému při výpočtu indukovaných dipólových momentů. Chandrasekhar řešil šíření elipticky polarizovaných vln krystalem, řádné a mimořádné, a pro každou z těchto vln počítal indukované elektrické dipólové momenty jedné dvojice spřažených oscilátorů. S různými orientacemi dvojice spřažených oscilátorů vzhledem k optické ose krystalu se vyrovnal tak, že výsledné indukované dipólové momenty hledal ve formě součtu dvou nezávislých složek - jedna složka vyplývala z šíření elipticky polarizovaných vln ve směru osy x a druhá ve směru kolmém, tedy ve směru osy y ; osa z je stále rovnoběžná s optickou osou krystalu. Řešení obou nezávislých složek je ale nutno provádět ve stejném souřadném systému. V Chandrasekharových výpočtech toto nebylo dodrženo, protože šíření vln ve směru osy x propočítával v pravotočivém a šíření ve směru osy y v levotočivém souřadném systému. Opravou této chyby v Chandrasekharových výpočtech se vztah (84) změní do podoby

$$\frac{\rho^\perp}{\rho^\parallel} = -\frac{\gamma x [(\alpha - \beta) (1 - \cos \theta) + (\alpha + \beta) \sin \theta]}{2d \sin \theta (\alpha^2 + \beta^2)}. \quad (85)$$

Tento výraz poskytuje výsledky (82) obdobně jako (81) pro $\varphi = 195^\circ$ a k této hodnotě odpovídající směrové kosiny.

Na závěr je však nutné připomenout, že Chandrasekhar podle svých závěrů úspěšně aplikoval své výsledky (84) na krystal α - křemene. Dnes je ale známo, že Chandrasekharu uvažovaný mechanismus optické aktivity α - křemene není

správný. Chandrasekhar jednotlivými oscilátory reprezentoval valenční elektrony, vibrující podél spojnice molekul kyslíku v každé molekule SiO_2 . Dnes je ale podstata optické aktivity α - křemene vysvětlována na jiných základech [6], které ve svých závěrech vedou prakticky ke stejnému mechanismu optické aktivity u atomárních i molekulárních krystalů.

5. Závěr

Jádrem předložené diplomové práce je řešení optické aktivity jednoosých krystalů pro vlnu šířící se ve směru kolmém k optické ose krystalu. Je zde zkoumána složka optické aktivity související se strukturou krystalu. K výpočtům je použito modelu tří spřažených oscilátorů, tento model dobře koresponduje se strukturou reálných krystalů. Podstatou modelu tří spřažených oscilátorů je to, že valenční elektrony strukturálních elementů reprezentujeme lineárními harmonickými oscilátory rozloženými na šroubovicích a tyto oscilátory považujeme za spřažené. Každý z těchto oscilátorů je popsán svou rovnovážnou polohou a jednotkovým vektorem určujícím směr vibrací oscilátoru. Základem práce je výpočet elektrických a magnetických dipólových momentů indukovaných procházející lineárně polarizovanou vlnou. Je zřejmé, že uvažujeme-li šíření elektromagnetické vlny kolmo k optické ose krystalu, tak musíme počítat s existencí řádné a mimořádné vlny. Zmiňované dipólové momenty vypočítáme zvlášť pro obě vlny a výsledek převedeme do podoby odpovídající tvaru Condonových relací. Z porovnání konečných vztahů pro polarizaci a magnetizaci s Condonovými relacemi získáme hodnotu optického rotačního parametru, ten přímo souvisí s komplexní rotační polarizací, tedy veličinou popisující optickou aktivitu.

Hlavní motivací k provedení této práce je fakt, že nejrozšířenější metoda řešení optické aktivity, Chandrasekharova metoda používající model dvou spřažených oscilátorů, je založena na chybě ve výpočtech. Tato skutečnost vedla k snahám hledat nové způsoby řešení optické aktivity. Řešení modelu tří spřažených oscilátorů použitím Condonových relací je jedním z nich. Tato metoda byla úspěšně použita při řešení optické aktivity ve směru optické osy. Bylo dokázáno, že tvar disperzních relací optické aktivity pro směr optické osy získaný Chandrasekharem je, až na hodnotu konstantního faktoru, správný. Cílem naší práce tedy bylo, dospět k podobným závěrům také pro směr kolmý k optické ose.

Získaný tvar disperzních relací pro disperzi rotační polarizace a kruhový dichroismus pro tento směr šíření elektromagnetických vln koresponduje v limitě použití modelu dvou spřažených oscilátorů s Chandrasekharovými závěry. Tyto závěry říkají, že frekvenční závislost v disperzních relacích pro rotační polarizaci a kruhový dichroismus je stejná pro šíření vln ve směru optické osy a ve směru kolmém k optické ose. Odlišnost je z tohoto pohledu pouze v hodnotě konstantního multiplikativního faktoru. Tento závěr se ovšem vzhledem k principům použité metody dal očekávat, protože stejná chyba v Chandrasekharových výpočtech se týkala obou směrů šíření vln. Výsledky této práce navíc navíc potvrzují možnost řešení optické aktivity krystalů ve směru kolmém k optické ose s využitím přímého výpočtu rotačních sil opticky aktivních kvantových přechodů [22].

Poměr konstantních faktorů v disperzních relacích pro směr šíření vln ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy tak má přímo význam poměru hodnot rotační polarizace a případně i kruhového dichroismu v těchto směrech. S využitím výsledků řešení modelu tří spřažených oscilátorů pomocí Condonových relací pro směr optické osy [18] byl vyřešen obecný vztah pro popis tohoto poměru. Tento vztah byl aplikován na atomární krystal teluru se závěrem, že získané výsledky pro poměr rotačních polarizací ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy korespondují se závěry práce [14]. Na druhé straně je nutno uvést, že získaný vztah se liší od korespondující relace, odvozené Chandrasekharem [8].

Pokud na případ atomárního krystalu teluru aplikujeme Chandrasekharův vzorec, obdržíme pro poměr rotační polarizace ve směru kolmém k optické ose a ve směru optické osy hodnotu velice blízkou k nule. To by ovšem mělo za následek, že telur je ve směru kolmém k optické ose opticky neaktivní. To ovšem odporuje realitě. V předložené práci je ale dokázáno, že důvodem je další chyba v Chandrasekharových výpočtech, která vyplývá z nedodržení jednotného souřadného systému v rámci celého řešení. Je dokázáno, že pokud provedeme v tomto smyslu korekci Chandrasekharových výpočtů, dojdeme ke speciálnímu typu našeho obecného vztahu pro konkrétní uspořádání dvojice spřažených oscilátorů, použité Chandrasekharem. Chandrasekhar uvádí, že jeho výsledek dává správnou hodnotu poměru rotační polarizace v uvedených směrech pro krystal α - křemene. Důvodem této shody bylo ovšem použití nesprávného mechanismu původu optické aktivity α - křemene v Chandrasekharově práci.

Literatura:

- [1] D.J. Caldwell, H. Eyring, The theory of optical activity, Wiley, New York, 1971.
- [2] S.C. McClain, L.W. Hillman, R.A. Chipman, Polarization ray tracing in anisotropic optically active media, *J. Opt. Soc. Am. A* (1993) 2383-2393.
- [3] A. Yariv, P. Yeh, *Optical waves in Crystals*, Wiley, New York, 1984.
- [4] J. Kobayashi, T. Takahashi, T. Hosokawa, A new method for measuring the optical activity of crystals and the optical activity of KH_2PO_4 , *J. Appl. Phys.* 49 (1978) 809-815.
- [5] J.R.L. Moxon, A.R. Renshow, I.J. Tebbutt, The simultaneous measurement of optical activity and circular dichroism in birefringent linearly dichroic crystals sections: II. Description of apparatus and results for quartz, nickel sulphate hexahydrate and benzil, *J. Phys. D* 24 (1991) 1187-1192.
- [6] A.M. Glazer, K. Stadnicka, On the origin of optical activity in crystal structures, *J. Appl. Crystallogr* 19 (1986) 108-122.
- [7] V.M. Agranovich, *Theory of excitons*, Nauka, Moscow, 1968 (v ruštině).
- [8] S. Chandrasekhar, Optical rotatory dispersion of crystals, *Proc. Roy. Soc. A* 259 (1961) 531-553.
- [9] V. Vyšín, Note on the theory of the rotatory dispersion of crystals, *Proc. Phys. Soc.* 87 (1966) 55-60.
- [10] V. Vyšín, Optical rotatory dispersion and circular dichroism of crystals, *Opt. Commun.* 1 (1970) 307-310.
- [11] I. Vyšín, K. Sváčková, J. Říha, Interpretation of the optical rotatory dispersion in tellurium, *J. Appl. Crystallogr.* 35 (2002) 96-102.
- [12] J. Říha, I. Vyšín, Optical activity of benzil crystal, *Czech. J. Phys.* 53 (2003) 727-742.
- [13] J. Říha, I. Vyšín, H. Lapšanská, Theory, measurement and origin of optical activity in benzil crystal, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 442 (2005) 181-201.
- [14] H. Zhong, Z.H. Levine, D.C. Allan, J.W. Wilkins, Bandtheoretic calculations of the optical-activity tensor of α quartz and trigonal Se, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 1384-1403.
- [15] L. Jonsson, Z.H. Levine, J.W. Wilkins, Large local-field corrections in optical rotatory power of quartz and selenium, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 1372-1375.
- [16] I. Vyšín, K. Sváčková, J. Říha, The possibility of application of the three coupled oscillator model in crystalline optical activity, *Opt. Commun.* 174 (2000) 455-465.
- [17] W. Kaminsky, Experimental and phenomenological aspects of circular birefringence and related properties in transparent crystals, *Rep. Prog. Phys.* 63 (2000) 1575-1640.
- [18] I. Vyšín, J. Říha, K. Sváčková, Note on the coupled oscillator model solutions in crystalline optical activity, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 8 (2006) 584-593.
- [19] E.U. Condon, Theories of optical rotatory power, *Rev. Mod. Phys.* 9 (1937) 432-457.
- [20] A.S. Dawydow, *Quantenmechanik*, VEB deutsche Verlag der Wissenschaft, Berlin, 1981.

- [21] L. Rosenfeld, Quantenmechanische Theorie der natürlichen optischen Activitaet von Fluessigkeiten und Gasen, Z. Phys. 52 (1928) 161-174.
- [22] I. Vyšín, J. Říha, H. Vavříková, An alternative method of dispersion relations derivation in the crystalline optical activity in the direction perpendicular to the optic axis, Optik 118 (2007) 407-417.
- [23] I. Vyšín, J. Říha, Application of Drude term in the interpretation of crystalline optical activity, Opt. Commun. 268 (2006) 90-98.
- [24] R. Keller, W.B. Holzapfel, H. Schule, Effect of pressure on the atom positions in Se and Te, Phys. Rev. B 16 (1977) 4404-4412.
- [25] H. Stolze, M. Lutz, P. Grosse, The optical activity of tellurium, Phys. Stat. Sol. B 82 (1977) 457-466.