

分子振动 和振动光谱

梁映秋 赵文运 编



北京大学出版社

分子振动和振动光谱

梁映秋 赵文运 编

G99/12

北京大学出版社

内 容 简 介

本书是结构化学研究生的专业基础课教材。全书共十章,主要介绍振动红外和振动拉曼光谱的基础理论,其中一、四两章分别对电磁辐射性质和点群作简要介绍;二、三、五、六章重点讲解分子振动的经典力学处理;第七章应用经典 GF 矩阵方法,通过近似计算,指定红外和拉曼光谱中各谱带对应的振动模式;第八章是拉曼效应的经典理论;九、十两章介绍分子振动的量子力学方法和红外、拉曼光谱的对称性选择定则。

本书也可供物理系有关专业研究生和从事教学科研工作的有关人员参考。

分子振动和振动光谱

梁映秋 赵文运 编著

责任编辑:孙德中

*

北京大学出版社出版

(北京大学校内)

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

850×1168 毫米 32 开本 10.5 印张 260 千字

1990 年 2 月第一版 1990 年 2 月第一次印刷

印数: 0001--3,000

ISBN 7-301-00824-4/O·148

定价: 2.60 元

目 录

第一章 电磁辐射的性质	1
1.1 经典电磁场	1
1.2 单色辐射的偏振状态	7
1.3 电磁辐射源	9
第二章 分子振动的经典力学处理	13
2.1 分子模型	13
2.2 分子运动的分离和 Sayvetz 条件	13
2.3 微振动的基本处理	22
2.4 简正坐标和振动的简正模式	27
2.5 久期方程的零根	35
2.6 Coriolis 能和 zeta 矩阵	37
第三章 内坐标处理分子振动	40
3.1 内坐标	40
3.2 内坐标的久期方程	41
3.3 B 矩阵的形成	47
3.4 构造 G 矩阵	60
3.5 对称形式的久期方程	62
3.6 力常数的计算	63
3.7 Coriolis 耦合常数.....	66
3.8 离心畸变常数	69
第四章 群论	71
4.1 分子对称性	71
4.2 群的定义和性质	75
4.3 群的分割	80
4.4 表示理论	81
4.5 矢量空间	84
4.6 不可约表示	95
4.7 正交关系式	98

4.8	直积	107
第五章	对称性的应用	113
5.1	分子振动的对称性	113
5.2	振动的对称分类	118
5.3	简正坐标的对称性	129
5.4	对称坐标	131
5.5	对称坐标的形成	136
5.6	用相关表求对称坐标	148
5.7	几种振动坐标的关系	152
第六章	补充的实验数据	156
6.1	同位素取代	156
6.2	同位素取代的微扰理论	169
6.3	Coriolis 耦合常数	176
6.4	离心畸变常数	178
6.5	均方振幅	182
第七章	简正坐标分析计算	185
7.1	势能函数	185
7.2	力常数的计算步骤	188
7.3	简化的一般价力场 (SGVFF)	210
7.4	多余坐标	214
7.5	逆力常数	223
第八章	拉曼效应	226
8.1	简介	226
8.2	感生电偶极矩	228
8.3	极化率张量	230
8.4	拉曼散射的经典理论	236
8.5	拉曼散射光的退偏振度	239
8.6	晶体拉曼散射	247
第九章	分子振动的量子力学处理	254
9.1	Born-Oppenheimer 近似	254
9.2	振动波动方程	255
9.3	多原子分子的能级	258

9.4	拉曼散射的半量子力学处理	262
9.5	散射光的能量转换	269
第十章	对称性的选择定则	272
10.1	μ 和 α 矩阵元的对称不变性	272
10.2	电偶极矩 μ 的对称性	273
10.3	散射张量 α 的对称性	274
10.4	基频能级波函数的对称性	277
10.5	合频能级波函数的对称性	279
10.6	泛频能级波函数的对称性	284
10.7	红外光谱选择定则	288
10.8	拉曼光谱选择定则	291
附录 I	点群特征标表	295
附录 II	相关表	314

第一章 电磁辐射的性质

1.1 经典电磁场

分子振动光谱讨论了电磁辐射和分子体系相互作用的所有过程。也就是说，这种相互作用可以用分子对红外辐射的吸收（红外光谱）或光散射（拉曼光谱）来测定和研究。对于化学工作者来说，分子体系是大家所熟知的，但和本课程有关的电磁辐射性质有必要作简要的回顾。

适用于所有电磁现象的麦克斯韦方程组：

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} &= 0\end{aligned}$$

及
$$\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (1.1.1)$$

其中 ∇ ：拉普拉斯算符

\mathbf{E} ：电场强度

ρ ：电荷密度

\mathbf{B} ：磁感应强度

\mathbf{j} ：电流密度

μ_0 ：真空中的磁导率

ϵ_0 : 真空中的介电常数

c : 光速

反映了整个电磁场的基本性质, 其它的性质都可以从此方程组推出。下面推导组成这种辐射的电场和磁场运动方程。

设在真空情况下, 则电荷密度 $\rho = 0$ 和电流密度 $\mathbf{j} = 0$, (1.1.1) 式简化为

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.1.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.1.5)$$

把 (1.1.3) 式改写为

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

利用公式 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$

则有 $\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B}$

把 (1.1.2) 式代入, 得

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} \quad (1.1.6)$$

再把 (1.1.5) 式代入 (1.1.6) 式, 则有

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{E} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \\ \nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} &= 0 \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

(1.1.7) 式就是电场运动方程。同样方法可以推得磁感应强度的波动方程

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1.8)$$

对于平面波, (1.1.7) 和 (1.1.8) 式的解是

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \alpha) \quad (1.1.9)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \alpha) \quad (1.1.10)$$

这个解对每个分量 E_x, E_y, E_z 和 B_x, B_y, B_z 都适合。其中 \mathbf{k} 是波矢量, ω 是圆频率, α 是相位角, 对于平面波

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n}$$

c 是光速, \mathbf{n} 是单位矢量, 它的方向是电磁波传播方向。若选择坐标系的原点在光源, 则 \mathbf{n} 与 \mathbf{r} 方向平行, 使 x 轴平行于电矢量, 则 z 轴方向就是 \mathbf{n} 方向

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} = \frac{\omega}{c} z$$

根据麦克斯韦方程结论, 这种波只有横波成分没有纵波成分, 也就是沿 z 轴方向传播的平面电磁波的电场强度只有 E_x 分量

$$\begin{aligned} E_x &= E_{x0} \cos\left(\frac{\omega}{c} z - \omega t + \alpha\right) \\ &= E_{x0} \cos\left[\omega\left(t - \frac{z}{c}\right) - \alpha\right] \\ &= E_{x0} \cos\left[\omega\left(t - \frac{z}{c}\right) + \theta_x\right] \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

式中 $\theta_x = -\alpha$ 。为了确定磁感应强度方向, 采用下面方法, 由 (1.1.3) 式

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1.12)$$

展开左端
$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{j} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial z} - \mathbf{k} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial y}$$

因为 \mathbf{E} 只是 z 的函数, 所以

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{j} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial z} = \mathbf{j} \frac{\omega}{c} E_{x0} \sin\left[\omega\left(t - \frac{z}{c}\right) + \theta_x\right]$$

这里的 \mathbf{j} 代表 y 方向的单位矢量。 (1.1.12) 式右端

$$-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\omega \mathbf{B}_0 \sin [\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \alpha]$$

左、右两端相等

$$\begin{aligned} & \mathbf{j} \frac{\omega}{c} E_{x0} \sin \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \theta_x \right] \\ & = -\omega \mathbf{B}_0 \sin \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \theta_y \right] \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

比较(1.1.13)式两端(相差一个负号)

$$\mathbf{B}_0 = \frac{\mathbf{j}}{c} E_{x0}$$

即
$$B_{y0} = \frac{1}{c} E_{x0} \quad (1.1.14)$$

实际上，通常用磁场强度 \mathbf{H} 而不用磁感应强度 \mathbf{B} ，真空情况下

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$$

所以
$$H_{y0} = \frac{1}{c\mu_0} E_{x0} \quad (1.1.15)$$

表明伴随电场强度随时间变化的(1.1.11)式

$$E_x = E_{x0} \cos \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \theta_x \right] \quad (1.1.16)$$

有磁场强度的变化

$$H_y = H_{y0} \cos \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \theta_y \right] \quad (1.1.17)$$

由此可知，磁场方向在 y 方向。式中 E_{x0} 和 H_{y0} 分别是 E_x 和 H_y 的极大值即振幅， ω 是圆频率， t 是时间， z 是沿 z 轴的位移， c 是传播速度， θ_x, θ_y 是相位角。这里 $\omega = 2\pi\nu$ ，其中 ν 是频率； $\nu = c\lambda^{-1}$ ， λ 是波长； $\tilde{\nu} = \lambda^{-1}$ ， $\tilde{\nu}$ 是波数；因此， $\nu = c\tilde{\nu}$ ，并且 $\omega = 2\pi c\tilde{\nu}$ 。

以上讨论，可得电磁场的一般性质，磁场强度垂直于电场强度，以光速沿右手螺旋指向传播。因为两式的相位角 θ_x 和 θ_y 相等，就是说在任何时间 t ， E_x 和 H_y 有同样的相对振幅，同时到达

最大值。也可以这样理解， E_x 和 H_y 取极大值的平面垂直于 n 并向 n 方向运动，所以称作平面电磁波。 E_x 和 H_y 的振幅比值为一常数，称为自由空间的阻抗，由下式给出

$$\begin{aligned} \frac{E_x}{H_y} &= \frac{E_{x0}}{H_{y0}} = \frac{E_{x0}}{\frac{1}{\mu_0 c} E_{x0}} \\ &= \mu_0 c = \mu_0 \epsilon_0^{-\frac{1}{2}} \\ &= 377 \text{ (欧姆)} \end{aligned} \quad (1.1.18)$$

下图表示，某一时刻 E_x 和 H_y 随 z 的变化，图中电磁波传播方向用坡印廷矢量 \mathcal{S} 表示

$$\mathcal{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

对于电磁波，坡印廷矢量表示沿波的传播方向，每单位面积的能量流。因此，坡印廷矢量的值等于下面介绍的辐照度。

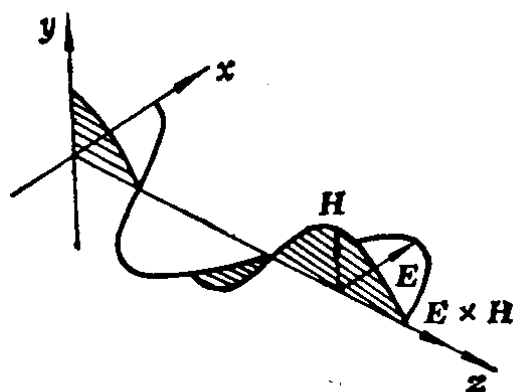


图 1.1.1 沿 z 轴方向进行的平面电磁波，在某一时刻 \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 随 z 的变化，矢量 $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ 给出了传播方向。

多数情况是，只关注选定的 z 值下， \mathbf{E} 或 \mathbf{H} 随时间的变化，若取 z 为零，则(1.1.16)式可化简为

$$E_x = E_{x0} \cos(\omega t + \theta_x) \quad (1.1.19)$$

如果相位不起重要作用，可取相位角 θ_x 为零，则可以进一步简化为

$$E_x = E_{x0} \cos \omega t \quad (1.1.20)$$

电磁场由电场和磁场两部分组成，电磁场的能量亦为两部分之和，电场能量密度

$$\rho_{\text{电}} = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_x^2 \quad (1.1.21)$$

磁场能量密度

$$\rho_{\text{磁}} = \frac{1}{2} \mu_0 H_y^2 \quad (1.1.22)$$

因为

$$\frac{\rho_{\text{电}}}{\rho_{\text{磁}}} = \frac{\epsilon_0}{\mu_0} \left(\frac{E_x}{H_y} \right)^2 = \frac{\epsilon_0}{\mu_0} (\mu_0 c)^2 = 1$$

所以在沿传播方向的某给定位置和给定时刻,总能量密度

$$\rho_{\text{总}} = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_x^2 + \frac{1}{2} \mu_0 H_y^2 = \epsilon_0 E_x^2 = \mu_0 H_y^2 \quad (1.1.23)$$

在一给定瞬间,电能密度,磁能密度和总的能量密度随 z 的变化如图 1.1.2 所示.

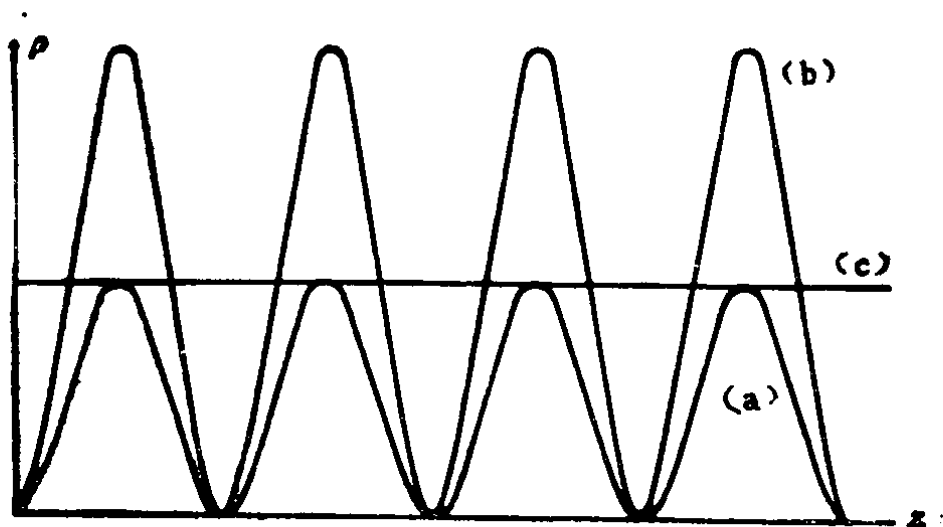


图 1.1.2 沿 z 轴行进的平面电磁波的能量密度 ρ 作为 z 的函数:

- (a) $\rho_{\text{电}} = \rho_{\text{磁}}$; (b) $\rho_{\text{总}} = \rho_{\text{电}} + \rho_{\text{磁}}$;
(c) 总能量密度的时间平均值.

对于本书所考虑波长范围的辐射,其周期要比任何探测器的响应时间小许多个数量级,例如波长 $\lambda = 5000 \text{ \AA} = 5 \times 10^3 \times 10^{-10} \text{ m}$ 的波,频率 $\nu = c/\lambda = 3 \times 10^8 / 5 \times 10^{-7} = 6.0 \times 10^{14} \text{ Hz}$,周期 $T = \frac{1}{\nu} = 1.7 \times 10^{-15} \text{ s}$ (秒),但是光电倍增管的响应时间大约是 10^{-8} s 量级,因此仅仅能够测出辐射的时间平均性质.对于 (1.1.19) 式的平面波,一周内电场强度和磁场强度平方的时间

平均值

$$\bar{E}_x^2 = E_{x0}^2 \cos^2(\overline{\omega t + \theta_x}) = \frac{1}{2} E_{x0}^2$$

和

$$\bar{H}_y^2 = H_{y0}^2 \cos^2(\overline{\omega t + \theta_y}) = \frac{1}{2} H_{y0}^2$$

平均能量密度

$$\bar{\rho}_B = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_{x0}^2 = \frac{1}{2} \mu_0 H_{y0}^2 \quad (1.1.24)$$

每秒通过垂直于传播方向的面上，单位面积的辐射能量可以由时间平均总能量密度 $\bar{\rho}_B$ 乘以传播速度得到，称为该面的辐照度 \mathcal{I}

$$\mathcal{I} = c\bar{\rho}_B = c\epsilon_0 \bar{E}_x^2 = \frac{1}{2} c\epsilon_0 E_{x0}^2 \quad (1.1.25)$$

用磁场强度表示时

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2} c\mu_0 H_{y0}^2 \quad (1.1.26)$$

1.2 单色辐射的偏振状态

图 1.1.1 所示的平面波，电矢量的振动方向在 x 方向，电矢量的振动平面是电场强度和传播方向组成的 xz 平面，这样的波称为是线偏振的或平面偏振的。

若有两个平面波，其中一个波的电矢量振动方向在 x ，另一个则在 y 方向。假如这两个平面波的传播方向和频率都相同，则这两个互相垂直的线偏振波组合起来的合成矢量 $\mathbf{E}(E_x, E_y)$ 终点轨迹是一个椭圆。

证明：利用(1.1.16)式，这两个波可以写成

$$E_x = E_{x0} \cos(\tau + \theta_x) \quad (1.2.1)$$

$$E_y = E_{y0} \cos(\tau + \theta_y) \quad (1.2.2)$$

式中 $\tau = \omega\left(t - \frac{z}{c}\right)$ ，设固定时间，因为传播方向相同（如 z 方

向), 频率相同, 所以(1.2.1)和(1.2.2)式中的 τ 相同, 但 θ_x 和 θ_y 不相同. 设 $\theta_y - \theta_x = \Delta\theta$, 由(1.2.1)和(1.2.2)式得

$$\frac{E_x}{E_{x0}} = \cos \tau \cos \theta_x - \sin \tau \sin \theta_x \quad (1.2.3)$$

$$\frac{E_y}{E_{y0}} = \cos \tau \cos \theta_y - \sin \tau \sin \theta_y \quad (1.2.4)$$

消去 τ , 得到

$$\frac{E_x^2}{E_{x0}^2} + \frac{E_y^2}{E_{y0}^2} - 2 \frac{E_x E_y}{E_{x0} E_{y0}} \cos \Delta\theta = \sin^2 \Delta\theta \quad (1.2.5)$$

由于

$$\delta = \frac{1}{E_{x0}^2 E_{y0}^2} - \left(\frac{\cos \Delta\theta}{E_{x0} E_{y0}} \right)^2 = \frac{\sin^2 \Delta\theta}{E_{x0}^2 E_{y0}^2} \geq 0 \quad (1.2.6)$$

只要 $\Delta\theta \neq m\pi$, 坐标为 (E_x, E_y) 点的轨迹一般是一个椭圆, 椭圆的性质取决于振幅 E_{x0} 和 E_{y0} 以及两波的相位差 $\Delta\theta = \theta_y - \theta_x$. 因此, 这些波称为是椭圆偏振的. 各种椭圆偏振的情形示于图 1.2.1, 其中两种特殊情形是重要的, 即椭圆退化为直线或圆.

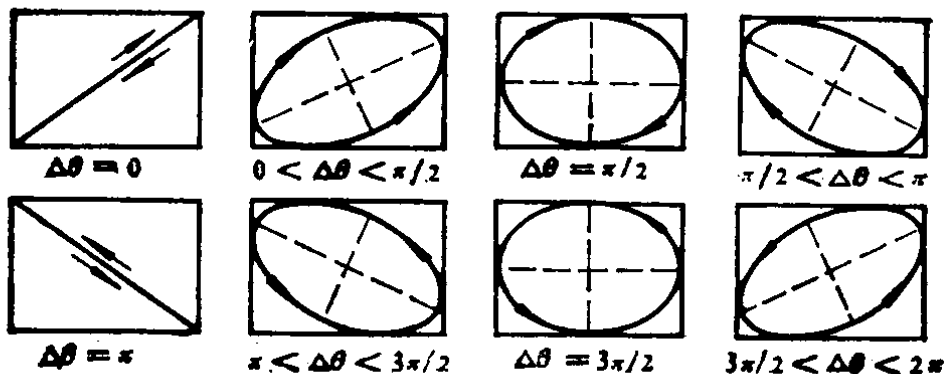


图 1.2.1 相位差 $\Delta\theta$ 取各种值的椭圆偏振.

由以上讨论可知, 严格的单色辐射(只有一个频率)是完全偏振的, 即空间每一点矢量(磁矢量也是如此)的终端绕一椭圆作周期运动, 在特殊情形下, 此椭圆退化为圆或直线. 实际上, 我们通常研究的辐射只是接近单色, 称为准单色的. 准单色辐射在一种极端情形下, 总的电矢量可以具有单色波的性质, 称为完全偏振的, 而另一种极端情形, 总的电矢量没有从优的方向性, 称为完全

不偏振的(或自然的)。许多情况下,特别是由散射产生的辐射,辐射是部分偏振的,它由完全偏振部分和完全不偏振部分组成。

当电磁辐射和分子体系相互作用时,偏振状态常常发生改变,完全偏振的人射辐射,也能观察到偏振态的改变,在拉曼散射中,这种改变是一重要的参数,因为它们与分子的对称性相关。

1.3 电磁辐射源

最重要的电磁辐射源是振荡电偶极子。当一对数值相等符号相反的电荷分开一定距离时就形成一个电偶极子。若 \mathbf{s} 是从电荷 $-q$ 到电荷 $+q$ 取向的矢量,其数值是电荷之间的距离,则偶极矩矢量 \mathbf{P} (数值为 P) 由下式给出:

$$\mathbf{P} = q\mathbf{s} \quad (1.3.1)$$

当 \mathbf{s} 或 q 变化时,就会引起 \mathbf{P} 的变化。若偶极子 \mathbf{P} 以圆频率 ω 作简谐振荡,则将向四周空间辐射圆频率为 ω 的电磁辐射。

假如一个分子中,电子分布是不对称的,则将具有所谓永久偶极矩。当分子振动时,偶极子大小随着变化,造成频率为振动频率的偶极子振荡而发射和偶极子振荡频率相同的辐射。吸收是发射的逆过程,发射圆频率 ω 辐射的体系,可吸收 ω 频率的辐射,这就是红外吸收光谱的经典图象。若分子中电子分布是对称的,则在平衡状态没有永偶极子,但是不对称的振动,仍然可能破坏电子分布的对称性而产生一个偶极子,而且也以分子振动的频率振荡,CO₂ 分子的反对称伸缩振动就是这样的例子。外电场作用下,分子产生感生电偶极子 \mathbf{P}_g , 此时偶极矩 \mathbf{P} 由两部分组成

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{永偶} + \mathbf{P}_g \quad (1.3.2)$$

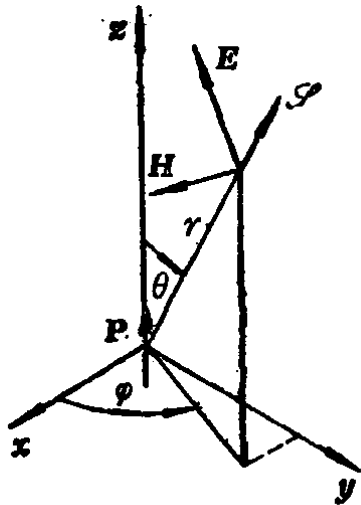
式中 $\mathbf{P}_{永偶}$ 电场恒定,这里不讨论它,我们只研究 \mathbf{P}_g , 如果分子不振动,感生偶极子以电场频率 ω 振荡。当分子以 ω_k 频率振动时,则产生以电场频率 ω 和 $\omega \pm \omega_k$ 振荡的感生偶极子,从而发射出 ω 和 $\omega \pm \omega_k$ 三种频率的辐射,这就是拉曼散射(包含瑞利散射)的经典图象。

任何以圆频率 ω 振荡的偶极子的简谐变化都可以表示为

$$\mathbf{P} = P_0 \cos \omega t \quad (1.3.3)$$

式中 P_0 是振荡偶极子的振幅矢量(数值是 P_0)。

图 1.3.1 规定了一个放置在原点的振荡电偶极子的取向和坐标系。根据经典电磁理论,极坐标为 r, θ, φ 的某点($r \gg$ 光波波长)的电场强度和磁场强度是



$$\mathbf{E} = \frac{-\omega^2 P \sin \theta \mathbf{j}}{4\pi \epsilon_0 c^2 r} \quad (1.3.4)$$

$$\mathbf{H} = \frac{-\omega^2 P \sin \theta \mathbf{k}}{4\pi c r} \quad (1.3.5)$$

式中 $P = P_0 \cos \left[\omega \left(t - \frac{r}{c} \right) \right] \quad (1.3.6)$

图 1.3.1 偶极子辐射示意图。单位极矢量 i, j, k 分别沿着 $\mathcal{S}, -\mathbf{E}$ 和 $-\mathbf{H}$ 矢量的方向。

可以看出, \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 都以速度 c 传播,且反比于距离 r ,它们都以 ω^2 的形式变化,即正比于频率的平方,它们的振幅也有同样的

由 $\sin \theta$ 所确定的角度依赖关系,因此偶极子发射辐射的强度各方向不同,如图 1.3.2 所示。由图可见,最强发射强度与偶极子成

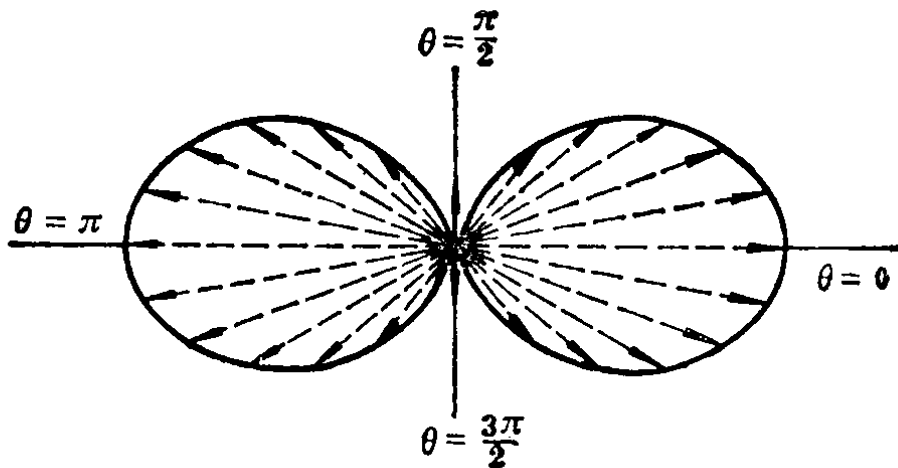


图 1.3.2 振荡电偶极发射辐射的方向性质。

直角,沿偶极子的轴强度为零。(1.3.4) 和 (1.3.5) 式中, \mathbf{j}, \mathbf{k} 为相互垂直的单位极矢量,所以发射辐射的 \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 方向相互垂直,并且 \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 的振幅比值是

$$\frac{1}{\epsilon_0 c} = \mu_0^{\frac{1}{2}} \epsilon_0^{-\frac{1}{2}} \quad (1.3.7)$$

以上结果表明,一个振荡偶极子产生的 \mathbf{E} 和 \mathbf{H} 矢量彼此相关,其关系和平面电磁波完全一样.因此一个圆频率为 ω 的振荡偶极子是圆频率为 ω 的电磁辐射发射源.利用(1.3.4)式在 r, θ, φ 处相应辐射的瞬时总能量密度

$$\rho_{\text{总}} = \epsilon_0 E^2 = \frac{\omega^4 P^2 \sin^2 \theta}{16\pi^2 \epsilon_0 c^4 r^2} = \frac{\pi^2 \tilde{\nu}^4 P^2 \sin^2 \theta}{\epsilon_0 r^2} \quad (1.3.8)$$

总能量密度的时间平均值

$$\bar{\rho}_{\text{总}} = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 = \frac{\omega^4 P_0^2 \sin^2 \theta}{32\pi^2 \epsilon_0 c^4 r^2} = \frac{\pi^2 \tilde{\nu}^4 P_0^2 \sin^2 \theta}{2\epsilon_0 r^2} \quad (1.3.9)$$

辐照度

$$\mathcal{I} = c \bar{\rho}_{\text{总}} = c \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 = \frac{c \pi^2 \tilde{\nu}^4 P_0^2 \sin^2 \theta}{2\epsilon_0 r^2} \quad (1.3.10)$$

一个振荡偶极子发出的辐射,在给定方向的强度,可以认为是环绕此方向的立体角 $d\Omega$ 内锥形光束所包含的功率 $d\Phi$ 与立体角之比

$$I = \frac{d\Phi}{d\Omega} \quad (1.3.11)$$

从辐照度的定义可知,与偶极子中心相距 r 处,单位时间通过面积 dA 从振荡偶极子发射出来的平均能量(通过 dA 的平均功率)是

$$d\Phi = \mathcal{I} dA = \frac{c \pi^2 \tilde{\nu}^4 P_0^2 \sin^2 \theta}{2\epsilon_0 r^2} dA$$

又因为

$$d\Omega = \frac{dA}{r^2}$$

所以

$$I = \frac{d\Phi}{d\Omega} = \frac{c \pi^2 \tilde{\nu}^4 P_0^2 \sin^2 \theta}{2\epsilon_0} \quad (1.3.12)$$

这就是在给定方向偶极子不严格的辐射强度.其中利用关系式

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi c\tilde{\nu}; \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\omega}{2\pi c}.$$