

Глава 6. Описание процессов взаимодействия излучения с веществом в случае, когда среда и поле квантуются [1,4,6,9,11,12]

6.1. Метод вторичного квантования

Изложенный в главе II подход к анализу процессов взаимодействия излучения с веществом можно сделать более последовательным, если осуществить квантование не только энергии атомов, но и энергии светового поля. Однако описанный выше способ квантования энергии электрона в атоме, при котором аргументами волновой функции являются координаты частицы, не может быть использован при квантовании поля излучения. Дело в том, что при взаимодействии света с веществом фотоны испускаются и поглощаются, поэтому проследить за поведением во времени какого-либо одного фотона не представляется возможным. При квантовании электромагнитного поля используется другой метод, получивший название метода вторичного квантования. Он основан на регистрации изменения во времени числа фотонов в том или ином конкретном состоянии. При этом аргументами волновой функции служат числа заполнения фотонами конкретных состояний.

Рассмотрим область пространства, имеющую форму куба со стороной L . Будем считать, что три ребра куба направлены по осям x , y , z . Пусть через эту область распространяется световая волна, волновой вектор которой $\vec{k} = \vec{i}k_x + \vec{j}k_y + \vec{k}k_z$. Потребуем, чтобы электрическое и магнитное поле удовлетворяли периодическим условиям на противоположных гранях куба:

$$\exp\{i[k_x x + k_y y + k_z z]\} = \exp\{i[k_x(x+L) + k_y(y+L) + k_z(z+L)]\}. \quad (6.1.1)$$

Эти условия предполагают, что перенос на расстояние L параллельно тому или иному ребру куба не меняет экспоненциального решения волнового уравнения. Из (1) вытекают следующие соотношения:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \quad (6.1.2)$$

где n_x , n_y , n_z – целые числа, изменяющиеся в интервале от $-\infty$ до $+\infty$. Последние соотношения показывают, что постоянные распространения составляют дискретную совокупность значений.

Рассмотрим пространство волновых векторов (k -пространство), в котором по осям ординат откладываются значения k_x , k_y , k_z . В силу из дискретности все пространство оказывается разбитым на отдельные ячейки "объемом"

$$\Delta_0 = 8\pi^3 / L^3 = 8\pi^3 / V. \quad (6.1.3)$$

Каждой такой ячейке можно поставить в соответствие две монохроматические волны, различающиеся поляризацией. Найдем число волн, приходящееся на интервал частот от ω до $\omega+d\omega$. Вводя функцию $g(\omega)$

распределения, это число можно определить произведением $g(\omega)d\omega$. Так как $\omega=ck$, то интервалу частот $d\omega$ в k -пространстве будет соответствовать шаровой слой радиуса $k=\omega/c$ и толщиной $dk=d\omega/c$. Его объем равен $4\pi k^2 dk=4\pi\omega^2 d\omega/c^3$. Если этот объем поделить на Δ_0 и умножить на два (с тем, чтобы учесть две поляризации), можно установить, что

$$g(\omega)d\omega = V\omega^2 d\omega / \pi^2 c^3. \quad (6.1.4)$$

Тот факт, что в k -пространстве поле волны описывается дискретным набором величин, позволяет разложить векторный потенциал по дискретному набору плоских монохроматических волн:

$$\bar{A} = \sum_k \left\{ \bar{A}_{\bar{k}}(t) \exp(i\bar{k}\bar{r}) + \bar{A}_{\bar{k}}^*(t) \exp(-i\bar{k}\bar{r}) \right\}, \quad A_k \sim e^{i\omega t}. \quad (6.1.5)$$

Используя связь (2.2.2), а также учитывая, что энергия W поля волны в объеме V

$$W = \frac{1}{4\pi} \int_V E^2(r,t) dV, \quad (6.1.6)$$

можно для W получить следующее выражение:

$$W = \sum_{\bar{k}} (\bar{P}_{\bar{k}}^2 + \omega^2 \bar{Q}_{\bar{k}}^2) / 2. \quad (6.1.7)$$

Здесь

$$\bar{Q}_{\bar{k}} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (\bar{A}_{\bar{k}} + \bar{A}_{\bar{k}}^*), \quad (6.1.8)$$

$$\bar{P}_{\bar{k}} = \frac{d}{dt} \bar{Q}_{\bar{k}} = -i\omega \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (\bar{A}_{\bar{k}} - \bar{A}_{\bar{k}}^*). \quad (6.1.9)$$

В механике Гамильтона "канонические переменные" $\bar{Q}_{\bar{k}}$ и $\bar{P}_{\bar{k}}$ играют роль соответственно обобщенной координаты и обобщенного импульса. Векторы $\bar{Q}_{\bar{k}}$ и $\bar{P}_{\bar{k}}$ имеют две независимые составляющие, соответствующие двум взаимно перпендикулярным направлениям поляризации, которые мы будем фиксировать индексом α . Тем самым (7) можно переписать в виде

$$W = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\bar{k}} W_{\bar{k}\alpha} = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\bar{k}} (\bar{P}_{\bar{k}\alpha}^2 + \omega^2 \bar{Q}_{\bar{k}\alpha}^2) / 2. \quad (6.1.10)$$

Структура выражения (10) показывает, что $W_{k\alpha}$ можно рассматривать как полную энергию линейного гармонического осциллятора $\bar{k}\alpha$ -типа, складывающуюся из кинетической ($\bar{P}_{\bar{k}\alpha}^2 / 2$) и потенциальной ($\omega^2 \bar{Q}_{\bar{k}\alpha}^2 / 2$) энергий. Каждому такому осциллятору можно поставить в соответствие

плоскую монохроматическую волну с волновым вектором \bar{k} и поляризацией α .

Квантование энергии электромагнитного поля, таким образом, может быть осуществлено аналогично квантованию энергии осциллятора, которое, как известно, производится путем перехода от величин $P_{\bar{k}\alpha}$ и $Q_{\bar{k}\alpha}$ к соответствующим операторам $\hat{p}_{\bar{k}\alpha}$ и $\hat{q}_{\bar{k}\alpha}$. С их помощью квантовомеханический гамильтониан осциллятора может быть записан в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{q}^2). \quad (6.1.11)$$

Заменяем \hat{q} и \hat{p} на пару операторов \hat{a} и \hat{a}^+ :

$$\hat{a} = (2\hbar\omega)^{-1/2}(\omega\hat{q} + i\hat{p}), \quad (6.1.12)$$

$$\hat{a}^+ = (2\hbar\omega)^{-1/2}(\omega\hat{q} - i\hat{p}). \quad (6.1.13)$$

С учетом (12), (13) гамильтониану (11) можно придать вид

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \quad (6.1.14)$$

Введем волновую функцию $\Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t)$. Квадрат ее модуля задает вероятность того, что в момент t в $\bar{k}\alpha$ -состоянии находится $N_{\bar{k}\alpha}$ фотонов. Воздействуя операторами $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}$ и $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}^+$ на функцию $\Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t)$, получаем

$$\hat{a}_{\bar{k}\alpha} \Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t) = \sqrt{N_{\bar{k}\alpha}} \Psi(N_{\bar{k}\alpha} - 1, t), \quad (6.1.15)$$

$$\hat{a}_{\bar{k}\alpha}^+ \Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t) = \sqrt{N_{\bar{k}\alpha} + 1} \Psi(N_{\bar{k}\alpha} + 1, t). \quad (6.1.16)$$

Из (15), (16) видно, что действие оператора $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}$ приводит к уничтожению одного фотона в $\bar{k}\alpha$ -состоянии, а действие оператора $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}^+$ – к рождению такого же фотона. Поэтому операторы $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}$ и $\hat{a}_{\bar{k}\alpha}^+$ получили название операторов соответственно уничтожения и рождения фотона.

Используя выражения (14), (15), (16), легко установить, что собственное значение оператора \hat{H} определяемое из уравнения

$$\hat{H}\Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t) = W_{\bar{k}\alpha} \Psi(N_{\bar{k}\alpha}, t), \quad (6.1.17)$$

равно

$$W_{\bar{k}\alpha} = \hbar\omega(N_{\bar{k}\alpha} + \frac{1}{2}). \quad (6.1.18)$$

Как следует из (18), даже в отсутствие фотонов энергия поля отлична от нуля. Энергия

$$W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (6.1.17)$$

называется энергией нулевых колебаний электромагнитного осциллятора.

6.2. Гамильтониан электрона в поле квантованного излучения

Осуществив квантование свободного электромагнитного поля, перейдем к рассмотрению системы, состоящей из электрона и излучения. Будем считать, что электрон имеет скорость малую по сравнению со скоростью света и описывается нерелятивистским квантовомеханическим гамильтонианом, который с учетом (2.2.1) может быть записан в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} + \frac{e}{c}\hat{A})^2 + U + H_{изл.} \quad (6.2.1)$$

Из (1) следует, что

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U + \frac{e}{mc}(\hat{p}\hat{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2 + H_{изл.} \quad (6.2.2)$$

Первые два слагаемых в (2) представляют собой гамильтониан электрона в атоме (в отсутствие поля), последнее слагаемое означает гамильтониан свободного поля излучения. Гамильтониан взаимодействия электрона с полем излучения имеет вид

$$\hat{V} = \frac{e}{mc}(\hat{p}\hat{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2. \quad (6.2.3)$$

Оператору A при помощи выражений (6.1.5), (6.1.8), (6.1.9), (6.1.12), (6.1.13) может быть придан вид

$$\hat{A} = \sum_s (\hat{a}_s \bar{A}_s + \hat{a}_s^+ \bar{A}_s^*). \quad (6.2.4)$$

Здесь s обозначает совокупность индексов α и \bar{k} , т.е. идентифицирует определенную плоскую монохроматическую волну. Вектор A_s равен

$$\bar{A}_s = \bar{e}_s \sqrt{2\pi c^2 \hbar / V \omega_s} \exp(i\bar{k}_s \bar{r}), \quad (6.2.5)$$

где \bar{e}_s – единичный вектор поляризации s -й волны, \bar{r} – радиус-вектор электрона, который также следует рассматривать как оператор.

Состояние полного поля можно записать как $|N_{S_1}, N_{S_2}, \dots\rangle$. Операторы \hat{a}_s и \hat{a}_s^+ , относящиеся к определенной волне, действуют только на ее фотоны. Так,

$$\hat{a}_{S_i} |N_{S_1}, N_{S_2}, N_{S_3}, \dots, N_{S_i}, \dots\rangle = N_{S_i}^{1/2} |N_{S_1}, N_{S_2}, \dots, N_{S_i} - 1, \dots\rangle, \quad (6.2.6)$$

$$\hat{a}_{S_i}^+ |N_{S_1}, N_{S_2}, N_{S_3}, \dots, N_{S_i}, \dots\rangle = (N_{S_i} + 1)^{1/2} |N_{S_1}, N_{S_2}, \dots, N_{S_i} + 1, \dots\rangle. \quad (6.2.7)$$

Для оператора \hat{A}^2 , входящего в (3), можно записать выражение

$$\hat{A}^2 = \sum_{S, S'} \left\{ \hat{a}_S \hat{a}_{S'} (\bar{A}_S \bar{A}_{S'}) + \hat{a}_S \hat{a}_{S'}^+ (\bar{A}_S \bar{A}_{S'}^*) + \hat{a}_S^+ \hat{a}_{S'} (\bar{A}_S^* \bar{A}_{S'}) + \hat{a}_S^+ \hat{a}_{S'}^+ (\bar{A}_S^* \bar{A}_{S'}^*) \right\}. \quad (6.2.8)$$

Учитывая свойства (6) и (7) операторов \hat{a}_s , \hat{a}_s^+ , можно сделать вывод, что оператор \hat{A}^2 описывает двухфотонные процессы. При таких процессах происходит испускание или поглощение двух фотонов или испускание одного фотона и поглощение другого.

В двухфотонные процессы дает вклад также и оператор $\frac{e(\hat{p}\hat{A})}{mc}$, но уже во втором приближении теории возмущений. Вероятность двухфотонных процессов значительно уступает вероятности однофотонных. Последняя зависит от оператора $\frac{e(\hat{p}\hat{A})}{mc}$.

6.3. Поглощение и испускание фотонов

Рассчитаем вероятность однофотонного поглощения и испускания. Предположим, что состояние электрона до поглощения описывается функцией φ_n , а после поглощения – функцией φ_m . Переход $n \rightarrow m$ идет, таким образом, с поглощением фотона, а $m \rightarrow n$ – с излучением фотона частоты ω_s . Матричный элемент оператора возмущения при поглощении фотона имеет вид

$$\langle m, N_S - 1 | \hat{V} | n, N_S \rangle = \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{V\omega}} \sqrt{N_S} \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm}. \quad (6.3.1)$$

где \hat{V} включает в себя лишь первое слагаемое в (6.2.3), отвечающее за однофотонные процессы, а

$$\left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm} = \int \varphi_m^*(\bar{r}) (\bar{p}\bar{e}_s) \exp(i\bar{k}\bar{r}) \varphi_n(\bar{r}) dV. \quad (6.3.2)$$

Однофотонные процессы соответствуют первому приближению теории возмущений. Поэтому для определения вероятности однофотонного поглощения можно воспользоваться формулой (5.2.9), считая, что матричный элемент в ней задается выражением (1). Поскольку энергия падающего на вещество фотона может меняться непрерывным образом, то процесс поглощения фотона в системе поле-вещество следует рассматривать как переход из размытого состояния на дискретный уровень. Тем самым функцию $\varphi(E)$ в (5.2.9) следует рассматривать не как плотность конечных, а как плотность начальных состояний. Функция $\varphi(E)$ совпадает с точностью до аргумента с функцией $g(\omega)$, задаваемой выражением (6.1.4) и определяющей число радиационных осцилляторов в интервале частот $d\omega$:

$$\varphi(E) = g(\omega) \frac{d\omega}{dE} = \hbar^{-1} g(E/\hbar). \quad (6.3.3)$$

Считая, что излучение имеет определенную поляризацию и распространяется внутри телесного угла $d\Omega$, можно с помощью (6.1.4) установить для него плотность радиационных осцилляторов

$$d\varphi = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3 \hbar} \frac{d\Omega}{8\pi}. \quad (6.3.4)$$

Путем подстановки (1) и (2) в (5.2.9) находим вероятность однофотонного поглощения

$$d\omega_\alpha = \frac{e^2 \omega}{2\pi\hbar c^3 m^2} N_S \left| \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm} \right|^2 d\Omega. \quad (6.3.5)$$

Аналогичные рассуждения позволяют установить выражение и для вероятности однофотонного испускания света. Соответствующий матричный элемент имеет вид

$$\left\langle m, N_S + 1 \left| \hat{V} \right| n, N_S \right\rangle = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar(N_S + 1)}{V\omega_S}} \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{-i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm}. \quad (6.3.6)$$

Используя выражение (5.2.9), находим, что вероятность испускания

$$d\omega_r = \frac{e^2 \omega}{2\pi\hbar c^3 m^2} (N_S + 1) \left| \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{-i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm} \right|^2 d\Omega. \quad (6.3.7)$$

Два слагаемых, присутствующих в (7), свидетельствуют о том, что $d\omega_r$ складывается из вероятности спонтанного испускания

$$d\omega_{sr} = \frac{e^2 \omega}{2\pi\hbar c^3 m^2} \left| \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{-i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm} \right|^2 d\Omega \quad (6.3.8)$$

и вероятности индуцированного испускания

$$d\omega_{ir} = \frac{e^2 \omega N_S}{2\pi\hbar c^3 m^2} \left| \left((\bar{p}\bar{e}_s) e^{-i\bar{k}\bar{r}} \right)_{nm} \right|^2 d\Omega. \quad (6.3.9)$$

С практической точки зрения приведенные выше выражения для вероятностей переходов целесообразно преобразовать так, чтобы в них вместо числа фотонов N_S входила плотность мощности поляризованного излучения $I_0(\omega)$. Предположим, что излучение с такой интенсивностью распространяется в телесном угле $d\Omega$ и занимает интервал частот $d\omega$. Число радиационных осцилляторов в указанных интервалах равно $\omega^2 V d\omega d\Omega / (2\pi c)^3$. Чтобы найти число фотонов N в единице объема, нужно умножить N_S на объем V

$$N = N_S \omega^2 d\omega d\Omega / (2\pi c)^3. \quad (6.3.10)$$

Плотность электромагнитной энергии в единице объема $\rho(\omega)$ будет определяться произведением

$$\rho(\omega) = N\hbar\omega. \quad (6.3.11)$$

Умножая ее на c , получаем

$$I_0(\omega) d\Omega d\omega = c\hbar\omega \frac{N_S \omega^2}{(2\pi c)^3} d\Omega d\omega. \quad (6.3.12)$$

Откуда

$$I_0(\omega) = \frac{N_S \hbar \omega^3}{(2\pi)^3 c^2}. \quad (6.3.13)$$

Одновременно с введением величины $I_0(\omega)$ перейдем к дипольному приближению. Во-первых, учтем, что в оптическом диапазоне длина волны λ намного превосходит размеры атома a ($\lambda \gg a$). Так как $r \leq a$, то $(\bar{k}\bar{r}) \ll 1$ и

$$\exp(\pm i\bar{k}\bar{r}) \approx 1. \quad (6.3.14)$$

Примем во внимание также следующие соотношения:

$$(\bar{p}\bar{e}_s)_{nm} = (\bar{p}_{nm})\bar{e}_s = i \frac{m\omega}{e} (\bar{\mu}_{nm})\bar{e}_s, \quad (6.3.15)$$

где $\bar{\mu}_{nm}$ – матричный элемент дипольного момента перехода. В отличие от рассмотрения, проведенного в главе II, мы не будем считать среду

изотропной. Тем самым, направление $\bar{\mu}_{nm}$ не должно в общем случае совпадать с \bar{e}_S . Обозначим угол между $\bar{\mu}_{nm}$ и \bar{e}_S через β . Тогда с учетом (13)-(15) выражения (5), (8), (9) примут вид (для случая, когда $\bar{\mu}_{nm} = \bar{\mu}_{mn}$)

$$d\omega_\alpha^D = d\omega_{ir}^D = \frac{I_0(\omega)}{c} b_{nm} d\Omega, \quad (6.3.16)$$

$$d\omega_{S_r}^D = a_{nm} d\Omega, \quad (6.3.17)$$

где b_{nm} и a_{nm} – дифференциальные коэффициенты Эйнштейна для индуцированного поглощения и спонтанного излучения, равные

$$b_{nm} = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^2 |\bar{\mu}_{nm}|^2 \cos^2 \beta, \quad (6.3.18)$$

$$a_{nm} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\bar{\mu}_{nm}|^2 \cos^2 \beta. \quad (6.3.19)$$

Для случая изотропного излучения и поглощения, когда свет распространяется по всем направлениям, выражения (18) и (19) необходимо проинтегрировать по всем возможным направлениям вектора \bar{k} , или соответственно β . В результате такого интегрирования дифференциальные коэффициенты b_{nm} и a_{nm} переходят в интегральные коэффициенты Эйнштейна

$$B_{nm} = \frac{2\pi |\bar{\mu}_{nm}|^2}{3\hbar^2}, \quad (6.3.20)$$

$$A_{nm} = \frac{4\omega^3 |\bar{\mu}_{nm}|^2}{3\hbar c^3}. \quad (6.3.21)$$

Знание величины A_{nm} позволяет определить время τ^D жизни атома в возбужденном состоянии по отношению к дипольному спонтанному испусканию

$$\tau^D = 1/A_{nm} = \frac{3\hbar c^3}{4\omega^3 |\bar{\mu}_{nm}|^2}. \quad (6.3.22)$$

6.4. Рассеяние света как двухфотонный процесс

Перейдем теперь от рассмотрения однофотонных процессов к анализу двухфотонного взаимодействия излучения с веществом. В качестве важного примера такого двухфотонного взаимодействия рассмотрим явление рассеяния света атомами. Предположим, что на атом падает фотон с волновым вектором \bar{k}_1 , а испускается фотон с вектором \bar{k}_2 . Обозначим

соответствующие частоты фотонов через ω_1 и ω_2 , а векторы поляризации – через e_1 и e_2 . Если частоты падающего и рассеянного фотона равны ($\omega_1 = \omega_2$) и атом после взаимодействия возвращается в исходное состояние, то рассеяние называется когерентным (релеевским). Наряду с когерентным возможно и комбинационное рассеяние света, происходящее с изменением частоты. Из закона сохранения энергии легко установить связь между частотами падающего и рассеянного фотонов

$$\hbar\omega_2 = \hbar\omega_1 + E_n - E_m, \quad (6.4.1)$$

где E_n – энергия атома в начальном состоянии φ_n , а E_m – в конечном – φ_m . Для удобства записи последующих соотношений представим оператор возмущения в виде суммы

$$\hat{V} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2, \quad (6.4.2)$$

где \hat{h}_1 и \hat{h}_2 – операторы, равные соответственно первому и второму слагаемому в правой части (6.2.3). Из выводов, сделанных в разделе 5.2, следует, что гамильтониан \hat{h}_2 описывает двухфотонные процессы в первом приближении теории возмущений, а гамильтониан \hat{h}_1 – во втором. Иными словами \hat{h}_2 описывает рассеяние света как прямые переходы, а \hat{h}_1 – как переходы через промежуточные состояния. Используя (5.2.9) и (5.3.1), запишем вероятность рассеяния света $d\omega_{nm}$ в виде

$$d\omega_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | \hat{h}_2 | n \rangle + \sum_k \frac{\langle m | \hat{h}_1 | k \rangle \langle k | \hat{h}_1 | n \rangle}{W_n - W_k} \right|^2 d\varphi. \quad (6.4.3)$$

Здесь $d\varphi$ – плотность конечных состояний, определяемая согласно (6.3.4) выражением

$$d\varphi = V\omega^2 d\Omega / (2\pi c)^3 \hbar, \quad (6.4.4)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла, в котором рассеивается фотон. Заметим, что не случайно в знаменателе членов, стоящих в (3) под знаком суммы, фигурирует разность $W_n - W_k$ (а не $E_n - E_k$). W_i в данном случае равно энергии всей квантовой системы, включающей как энергию электрона, так и фотонов. Будем считать, что в начальном состоянии поле излучения состоит из N_1 фотонов в состоянии $S = 1$ и N_2 фотонов в состоянии $S = 2$. Рассеяние приведет к тому, что указанные числа заполнения примут соответственно значения $N_1 - 1$ и $N_2 + 1$.

Как и в случае однофотонных переходов, определение вероятности рассеяния света сведется к корректному расчету матричных элементов

гамильтонианов возмущения. Используя формулы (6.2.5) и (6.2.8), можно установить, что

$$\langle m | \hat{h}_2 | n \rangle = \frac{2\pi\hbar e^2 (\bar{e}_1 \bar{e}_2)}{mV \sqrt{\omega_1 \omega_2}} \sqrt{N_1(N_2 + 1)} \int \varphi_m^* \exp[i(\bar{k}_1 - \bar{k}_2)\bar{r}] \varphi_n dV. \quad (6.4.5)$$

Используя приближение (6.3.14), можно положить экспоненциальную функцию в (5) равной единице. Тогда с учетом ортогональности функций φ_n и φ_m перепишем (5) в виде

$$\langle m | \hat{h}_2 | n \rangle = \frac{2\pi\hbar e^2 (\bar{e}_1 \bar{e}_2)}{mV \sqrt{\omega_1 \omega_2}} \sqrt{N_1(N_2 + 1)} \delta_{nm}. \quad (6.4.6)$$

И так, если состояние атома при рассеянии света не меняется и $\varphi_n = \varphi_m$, то $\delta_{nm} = 1$. Если же состояние изменяется, то $\delta_{nm} = 0$. Таким образом, матричный элемент $\langle m | \hat{h}_2 | n \rangle$ характеризует лишь когерентные двухфотонные процессы.

При расчете входящей в (3) суммы по k следует учесть, что возможны два типа промежуточных состояний, по которым производится суммирование. При переходе в промежуточное состояние первого типа происходит поглощение фотона в состоянии $S=1$, затем при последующем переходе из промежуточного состояния в конечное испускается фотон, у которого $S=2$. При переходе в промежуточное состояние второго типа сначала происходит излучение фотона с $S=2$, затем поглощается фотон с $S=1$ и система переходит из промежуточного состояния в конечное. С учетом этого обстоятельства, а также с использованием свойств оператора \hat{h}_1 , вытекающих из соотношений (6.2.3), (6.2.4) и (6.2.5) можно установить, что

$$\sum_k \frac{\langle m | \hat{h}_1 | k \rangle \langle k | \hat{h}_1 | n \rangle}{W_n - W_k} = \frac{2\pi\hbar e^2 \sqrt{N_1(N_2 + 1)}}{V \sqrt{\omega_1 \omega_2} m^2} \sum_k \left[\frac{(\bar{p}\bar{e}_2)_{mk} (\bar{p}\bar{e}_1)_{kn}}{E_n - E_k + \hbar\omega_1} + \frac{(\bar{p}\bar{e}_1)_{mk} (\bar{p}\bar{e}_2)_{kn}}{E_1 - E_2 - \hbar\omega_2} \right] \quad (6.4.7)$$

Первый член в квадратной скобке выражения (7) отвечает за переход через промежуточные состояния первого типа, второй член связан с промежуточными состояниями второго типа.

На основе (3) с учетом (6) и (7) можно найти дифференциальное сечение рассеяния света

$$d\sigma_{nm} = dw_{nm} \frac{V}{N_1 c} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} (N_2 + 1) |M_{mn}|^2 d\Omega. \quad (6.4.8)$$

где $r_0 = e^2 / mc = 2,8 \cdot 10^{-15}$ м – классический радиус электрона,

$$M_{mn} = (\bar{e}_1 \bar{e}_2) \delta_{12} + \frac{1}{m} \sum_k \left[\frac{(\bar{p} \bar{e}_2)_{mk} (\bar{p} \bar{e}_1)_{kn}}{E_n - E_k + \hbar \omega_1} + \frac{(\bar{p} \bar{e}_1)_{mn} (\bar{p} \bar{e}_2)_{kn}}{E_n - E_k - \hbar \omega_2} \right]. \quad (6.4.9)$$

В (8) можно выделить два слагаемых. Одно из них

$$d\sigma_{nm,i} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} N_2 |M_{mn}|^2 d\Omega. \quad (6.4.10)$$

характеризует сечение вынужденного рассеяния, другое

$$d\sigma_{nm,s} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} |M_{mn}|^2 d\Omega \quad (6.4.11)$$

определяет сечение спонтанного рассеяния.

При когерентном рассеянии света, когда $\varphi_n = \varphi_m$ и $\omega_1 = \omega_2$ дифференциальное сечение рассеяния приобретает вид

$$d\sigma = r_0^2 (N_2 + 1) \left| \cos \theta + \frac{1}{m} \sum_k \left[\frac{(\bar{p} \bar{e}_2)_{nk} (\bar{p} \bar{e}_2)_{kn}}{E_1 - E_k + \hbar \omega_1} + \frac{(\bar{p} \bar{e}_1)_{nk} (\bar{p} \bar{e}_2)_{kn}}{E_1 - E_k - \hbar \omega_1} \right] \right|^2 d\Omega \quad (6.4.12)$$

Если энергия падающего фотона намного превосходит энергию связи электрона, так что $\hbar \omega_1 \gg E_n - E_k$, то (12) упрощается:

$$d\sigma = r_0^2 (N_2 + 1) \cos^2 \theta d\Omega. \quad (6.4.13)$$

Это выражение совпадает с известной классической формулой рассеяния света на свободном электроне.

Для чисто комбинационного рассеяния, когда $\varphi_n \neq \varphi_m$ и $\omega_1 \neq \omega_2$ формула (8) может быть переписана следующим образом:

$$d\delta_{nm} = r_0^2 \frac{\omega_2}{\omega_1} (N_2 + 1) \left| \frac{1}{m} \sum_k \left[\frac{(\bar{p} \bar{e}_2)_{mk} (\bar{p} \bar{e}_1)_{kn}}{E_1 - E_k + \hbar \omega_1} + \frac{(\bar{p} \bar{e}_1)_{mk} (\bar{p} \bar{e}_2)_{kn}}{E_1 - E_k - \hbar \omega_2} \right] \right|^2 d\Omega. \quad (6.4.14)$$

Из нее видно, что комбинационное рассеяние связано только с переходами через промежуточные состояния.

6.5. Многофотонный резонанс

Изложенные во второй главе результаты, описывающие динамику двухуровневой системы в резонансном внешнем поле, относятся к однофотонному взаимодействию. С использованием материала настоящей и предшествующей глав они могут быть обобщены на случай, когда резонанс является многофотонным, т.е. расстояние между уровнями близко к целому числу величин $\hbar \omega$. Естественно, такие резонансы имеют место в полях с

существенно более высокой интенсивностью, чем при однофотонном резонансе.

Для реализации двухфотонного резонанса необходимо, чтобы рассматриваемые уровни имели одинаковую четность. Поэтому, в отличие от однофотонного резонанса двухфотонный резонанс, строго говоря, не может быть описан лишь в рамках двухуровневой модели. Этот эффект может проявляться лишь при наличии дополнительных уровней, переходы на которые из основного состояния, а также переходы с которых в конечное состояние являются разрешенными для дипольного взаимодействия. С учетом (1.2.11) уравнения (2.1.3) и (2.1.4) для двухфотонного резонанса могут быть модернизированы следующим образом:

$$i\hbar \frac{da_{nn}}{dt} = \Lambda_{mn} a_{nm} \exp(-i\Delta_2 t) + \Lambda_{nn} a_{nn}, \quad (6.5.1)$$

$$i\hbar \frac{da_{nm}}{dt} = \Lambda_{nm} a_{nn} \exp(i\Delta_2 t) + \Lambda_{mm} a_{nm}, \quad (6.5.2)$$

где Λ_{mn} – матричный элемент оператора возмущений, рассчитанный во втором порядке (см. (5.3.2)).

Отличительной особенностью уравнений (1) и (2) по отношению к аналогичным уравнениям, записанным в 1-м порядке теории возмущений, является то, что в них присутствуют диагональные матричные элементы оператора возмущений Λ_{nn} и Λ_{mm} . Последние в отличие от диагональных матричных элементов, рассчитанных в первом порядке, не равны нулю.

Анализ решения системы (1) и (2) показывает, что ему может быть придан вид, схожий с выражением (2.3.13) и (2.3.14). Различие состоит лишь в том, что присутствующая в них частота осцилляций амплитуд вероятностей Ω должна быть заменена на частоту Ω_2 равную

$$\Omega_2 = \frac{1}{2\hbar} \left[(2\hbar\omega - \hbar\omega_2 + \Lambda_{mm} - \Lambda_{nn})^2 + 4\Lambda_{mn}^2 \right]^{1/2}. \quad (6.5.3)$$

Из сравнения (3) с формулами (2.3.15) и (2.3.21) видно, что ширина двухфотонного резонанса, определяемая квадратом элемента Λ_{mn} , в силу малости последнего значительно меньше ширины однофотонного резонанса.

Глава 7. Светодинамика атомов [13]

Поглощение и излучение фотонов атомами приводит к ряду динамических эффектов, представляющих интерес как с практической, так и теоретической точек зрения. В настоящей главе рассматривается так называемый селективный эффект светового давления на атомы, возникающий при резонансном взаимодействии излучения с атомными системами.

7.1. Сила светового давления

Для простоты будем считать, что в поле световой волны находится двухуровневый атом. Условие стационарности процессов в системе имеет вид

$$N_+ = N_- + N_i, \quad (7.1.1)$$

где N_+ – число поглощенных фотонов, N_- – число вынужденно излученных фотонов, N_i – число спонтанно испускаемых фотонов. Волновые векторы поглощаемого \bar{k}_+ и вынужденно испускаемого \bar{k}_- фотонов параллельны и направлены в одну сторону. Волновой вектор \bar{k}_i спонтанно испускаемого фотона случайным образом ориентирован относительно векторов \bar{k}_+ и \bar{k}_- .

Если в начальный момент времени $t=0$ импульс фотона равен \bar{p}_0 , то спустя время $\Delta t \gg \tau_2$, где τ_2 – время жизни атома в возбужденном состоянии, импульс станет равным

$$\bar{p} = \bar{p}_0 + \Delta\bar{p} = \bar{p}_0 + \hbar\bar{k}(N_+ - N_-) + \sum_i^{N_i} \hbar\bar{k}_i, \quad (7.1.2)$$

где величина $\hbar\bar{k}$ характеризует изменение импульса атома при поглощении и испускании. Второй член в выражении (2) определяет изменение импульса в результате вынужденных переходов, а третий – за счет спонтанных.

В случае сильного светового поля, когда вероятность вынужденного перехода значительно превосходит вероятность спонтанного испускания, последним членом в (2) можно пренебречь. При не слишком интенсивном излучении вероятность спонтанных переходов нельзя считать пренебрежимо малой величиной и число актов поглощения может заметным образом превосходить число актов вынужденного испускания. Последнее обстоятельство приводит к тому, что импульс атома в среднем увеличивается в направлении \bar{k}_+ . Движение атома носит характер дрейфа в направлении \bar{k}_+ , сопровождающегося флуктуациями во всех направлениях (см. рис.7.1).

Из соотношений (1) и (2) следует, что среднее увеличение импульса равно

$$\Delta\bar{p} = \hbar\bar{k}(N_+ - N_-) = \hbar\bar{k}N_i. \quad (7.1.3)$$

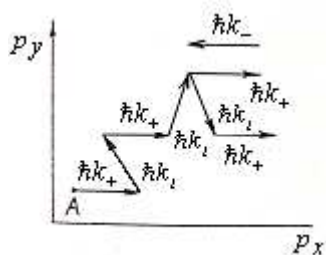


Рис.7.1. Изменение импульса атома A в результате поглощения и испускания фотонов; $|\bar{k}_+| = |\bar{k}_-| = |\bar{k}_i|$.

Используя последнее соотношение, находим, что сила светового давления на атом равна:

$$\bar{G} = \Delta\bar{p} / \Delta t = \hbar\bar{k}\Delta N_i / \Delta t = \hbar\bar{k}dN_i / dt. \quad (7.1.4)$$

Число спонтанных переходов с верхнего состояния в единицу времени dN_i / dt можно выразить через вероятность спонтанного перехода с верхнего уровня $\omega_{2 \rightarrow 1}$ и естественную ширину γ_2 этого уровня:

$$dN_i / dt = n_2 \omega_{2 \rightarrow 1} \approx n_2 \gamma_2. \quad (7.1.5)$$

Здесь n_2 – заселенность верхнего уровня.

С учетом того, что ее максимальное значение равно $1/2$, из (4) и (5) находим выражение для максимальной силы светового давления

$$G_{\max} = \hbar\bar{k}\gamma_2 / 2 = \hbar\bar{k}\tau_2^{-1} / 2, \quad (7.1.6)$$

где τ_2 – естественное время жизни атома в верхнем состоянии. Выражения (5) и (6) примечательны в том отношении, что связывают классическую величину – силу – с квантовыми характеристиками резонансного взаимодействия.

7.2. Ускорение и замедление атомов в световом поле

Описанный выше механизм светового давления обуславливает ускорение атомов в световом поле. Однако, интенсивность этого процесса невелика. Действительно, оценки, выполненные по формуле (7.1.6), для характерных оптических переходов дают для G_{\max} значения порядка $10^{-3} - 10^{-4}$ эВ/см. Эта величина столь мала, что эффективно ускорять атом, используя световое давление, практически невозможно.

Еще более проблематичной, на первый взгляд, представляется возможность замедлять движение атома, воздействуя на него световой волной. Однако, если посмотреть на взаимодействие атома со светом, как на процесс рассеяния фотонов, можно увидеть некоторую перспективу в использовании антистоксова рассеяния. При таком рассеянии энергия рассеянного фотона превосходит энергию падающего. Передача световому

полно дополнительной энергии возможна лишь за счет энергии атома. Потеря последней приводит к уменьшению его скорости.

Потеря энергии атомом при взаимодействии со светом может происходить также за счет эффекта Доплера. Пусть навстречу друг другу распространяются два пучка, один из которых световой, а другой – атомарный. Атомы по-прежнему будем считать двухуровневыми. Частоту перехода в покоящейся двухуровневой системе положим равной ω_0 . В силу эффекта Доплера для резонансного взаимодействия с атомами частота ω света, распространяющегося навстречу атомам, должна быть меньше ω_0 , а именно

$$\omega = \omega_0(1 - v/c) < \omega_0, \quad (7.2.1)$$

где V – скорость атомов. Тем самым, в ходе рассматриваемого процесса поглощаются фотоны с частотой $\omega < \omega_0$, а излучаются (спонтанно) фотоны с частотой ω_0 . Таким образом, при каждом акте взаимодействия кинетическая энергия атома уменьшается на величину

$$\Delta E = \hbar\omega(v/\tilde{h}). \quad (7.2.2)$$

Физической причиной замедления движения атома является то, что поглощается фотон в лабораторной системе координат, а излучается – в системе, связанной с атомом. Как видно из соотношения (1), световое давление тормозит атомы, обладающие скоростью $v_{рез} = c(1 - \omega/\omega_0)$. Число таких атомов в процессе взаимодействия уменьшается. Поскольку при этом возрастает число атомов с невысокими скоростями, дальнейшее торможение атомного пучка возможно лишь при изменении частоты излучения.

Из формулы (2) следует, что для уменьшения энергии атома на величину 10^{-2} эВ, т.е. для практически полного охлаждения атомов, имеющих в начале комнатную температуру, необходимо $\sim 10^4$ актов поглощения излучения. Эта величина вполне достижима при длительности взаимодействия атомов с полем $\tau \sim 10^4$ с и длине пути атомов в поле ~ 1 см.

Таким образом, выше проведенное рассмотрение показывает, что использование эффектов светового давления не является перспективным с точки зрения ускорения атомов. В то же время их эффективность весьма значительна при организации замедления частиц газа.

7.3. Светоиндуцированный дрейф в смеси атомов

В отличие от рассмотренных выше эффектов явление светоиндуцированного дрейфа в смеси атомов не связано с проявлением светового давления. Однако и оно обусловлено резонансным возбуждением атомов.

Рассмотрим газ, состоящий из атомов двух сортов A и B . Будем считать давление газа достаточно высоким, так что среднее время между соударениями атомов меньше времени жизни в возбужденном состоянии.

Направим на газ поток излучения, частота которого совпадает с частотой одного из переходов в атомах A , которые двигаются в определенном направлении, например, в направлении распространения излучения. Часть атомов, двигающихся в этом направлении, окажется в возбужденном состоянии.

Эффективное сечение соударений возбужденных атомов A^* с атомами B больше, чем сечение соударения между атомами A и B . Это связано с тем, что размер возбужденного атома A^* превосходит размер атома A , находящегося в основном состоянии. Различие в эффективных сечениях соударений означает, что для возбужденных атомов, движущихся в направлении распространения излучения, длина свободного пробега λ^* меньше длины пробега λ атомов A , двигающихся навстречу излучению. Последние в силу эффекта Доплера не возбуждаются лазерным излучением. Указанный процесс приводит к результирующему смещению (дрейфу) атомов A навстречу излучению. Расчеты показывают, что сила тока при этом дрейфе может быть определена из формулы

$$\mathfrak{J} = (1/3)(\lambda - \lambda^*)nv, \quad (7.3.1)$$

где n – плотность атомов A , v – их средняя скорость.

В ходе исследований эффекта светоиндуцированного дрейфа была установлена его перспективность для технологий, связанных с обогащением газовых смесей заданной компонентой. В частности, применение указанного эффекта позволяет изменять концентрацию резонансной примеси в буферном газе на несколько порядков величины, т.е. очень эффективно разделять газовые смеси.