«Оптика атмосферы и океана», **11**, № 2–3 (1998)

УДК 530.145:535.3

В.Н. Иванов

ГЕНЕРАЦИЯ АНСАМБЛЕМ АТОМОВ, ДРЕЙФУЮЩИМ В МАРКОВСКОМ ТЕРМОСТАТЕ, ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ РАССЕИВАЕМОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Теоретически рассматривается нелинейный эффект, возникающий в случае, когда на рассеивающие свет атомы возмущающие их частицы налетают преимущественно с одной стороны. Показано, что у таких атомов из-за анизотропии свойств окружающей среды индуцируется квазипостоянный мультипольный момент. Взаимодействие этого момента с внешним излучением должно приводить к появлению в рассеянном резонансном излучении гармоник основной частоты.

Нелинейный эффект, который может иметь место, когда на рассеивающие свет атомы возмущающие их частицы налетают преимущественно с одной стороны, рассматривается теоретически. Ситуация может возникнуть, например, при облучении ансамбля атомов пучком электронов.

Очевидно, что при наличии у возмущающих частиц некоторого выделенного направления движения электронные оболочки атомов будут деформироваться преимущественно с одной стороны. В результате у атомов должен индуцироваться некоторый мультипольный момент. Причем его средняя по ансамблю атомов величина должна быть отлична от нуля. При прохождении в среде таких атомов когерентного излучения вследствие взаимодействия его с этим мультипольным моментом возможен поворот плоскости поляризации падающего излучения, а при некоторых дополнительных условиях и преобразование его частоты. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

Основной проблемой, которая возникает при попытке учесть некоторую анизотропию окружающей среды (которую мы в дальнейшем будем трактовать как термостат с марковскими статистическими свойствами), является введение в уравнения Шредингера или Неймана операторов, которые бы позволяли это сделать. Эти операторы кроме упомянутой анизотропии должны учитывать столкновительный характер взаимодействия атомов с возмущающими частицами.

В данной статье для этих целей используется метод, основанный на усреднении волновых функций по влиянию термостата еще на стадии построения уравнения Шредингера [1, 2]. В нем уравнение для ψ-функции строится с помощью метода интегралов по путям Фейнмана [3] при усреднении пропагатора по всем возможным реализациям виртуальных траекторий в среде, окружающей выделенную квантовую подсистему. В общем случае это уравнение является нелинейным. Однако его решение можно найти, если принять во внимание несколько соотношений, справедливых для удовлетворяющих ему волновых функций $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)/\sqrt{\langle\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\,|\,\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle}\,; \qquad (1)$$

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\varkappa}{1+i\alpha}\,t + \frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\left(\left(\mathbf{A} + \frac{c}{e}(1-i\alpha)\frac{m\mathbf{V}}{2}\right)\cdot\mathbf{r}\right) + \frac{im}{8\hbar}(1+i\alpha)\int \mathbf{V}^2\,dt\right)\psi_1(\mathbf{r}, t); \qquad (2)$$

$$i\hbar\frac{\partial y_1}{\partial t} = \frac{1}{1+ia}(\hat{H} - U)\,\psi_1 + \left(U + \frac{e}{2}\left(\mathbf{V}\int \mathbf{E}dt\right)\right)\psi_1 - \frac{m}{2e}(1-i\alpha)\left(\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t}\cdot\mathbf{d}\right)\psi_1 - \frac{m}{8}(1+i\alpha)\,\mathbf{V}^2\,\psi_1 + (\mathbf{E}\cdot\mathbf{d})\,\psi_1. \quad (3)$$

В формуле (2) и уравнении (3) $\hat{H}$ – гамильтониан невозмущенного атома; U – оператор потенциальной энергии; $\mathbf{A}$ и $\mathbf{E}$ – векторный потенциал и напряженность электрической составляющей внешнего электромагнитного поля; $\mathbf{d}$ – дипольный момент атома; e и m – заряд и масса электрона. Кроме того, в (2) и (3) присутствуют два неотрицательных параметра α и $\varkappa$; их величина тем больше, чем больше плотность термостата. Вектор $\mathbf{V}$ описывает скорость направленного дрейфа выделенного атома относительно окружающей среды (в общем случае $\mathbf{V}$ может зависеть от времени).

Наличие в записанных выше выражениях скорости движения выделенной квантовой подсистемы (выделенного атома) относительно термостата позволяет, по сути дела, учесть его анизотропию (наличие преимущественного направления движения ансамбля его частиц). Действительно, с точки зрения математических выкладок безразлично, движется ли выделенная квантовая система в термостате или частицы термостата движутся относительно ее. Наличие предпочтительного направления, с которого налетают возмущающие атом частицы, может приводить, как уже отмечалось, к индуцированию у него дополнительного мультипольного момента.

Найдем его. Причем для наглядности ограничимся двухуровневым приближением.

Будем полагать, что на систему одинаковых атомов, взаимодействующих с термостатом, падает монохроматическое излучение, близкое по частоте к собственной частоте квантового перехода со второго уровня на первый:

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}), \quad (4)$$

где $\mathbf{E}_0$ – амплитуда поля (предполагаем, что она имеет фиксированное направление); ω – частота; **K** – волновой вектор; **R** – радиус-вектор точки, где находится атом.

Решение уравнения для вспомогательной функции $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ в резонансном приближении имеет вид

$$\psi_1(\mathbf{r}, t) = (C_1 \exp(\beta_1 t) + C_2 \exp(\beta_2 t)) \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1\, t - \frac{\alpha}{\hbar}(E_1 - U_{11})\, t\right) \psi_1(\mathbf{r}) +$$
$$+ (C_1\beta_1 \exp(-\beta_2 t) + C_2\beta_2 \exp(-\beta_1 t)) \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2\, t - \frac{\alpha}{\hbar}(E_2 - U_{22})\, t\right) \psi_2(\mathbf{r}) \frac{i2\hbar}{e\,(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{12})} \times$$
$$\times \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}). \quad (5)$$

Здесь $\psi_i(\mathbf{r})$ $(i = 1, 2)$ – собственные координатные функции нижнего и верхнего уровней атома. Константы C_i определяются начальными условиями. Величины β_i приближенно равны:

$$\beta_1 \approx (i\varepsilon - \gamma_{21})/2 + i\Omega - \varepsilon\gamma_{21}/4\Omega; \quad (6)$$

$$\beta_2 \approx (i\varepsilon - \gamma_{21})/2 - i\Omega + \varepsilon\gamma_{21}/4\Omega. \quad (7)$$

В формулах (6), (7) ε – это отстройка частоты:

$$\varepsilon = \omega - (E_2 - E_1)/\hbar, \quad (8)$$

γ_{21} – параметр, равный разности

$$\gamma_{21} = \alpha\,(E_2 - U_{22})/\hbar - \alpha\,(E_1 - U_{11})/\hbar \quad (9)$$

(при дальнейшем рассмотрении будем полагать, что точного резонанса нет ($|\varepsilon| \gg |\gamma_{21}|$), но отстройка частоты достаточно мала: $|\varepsilon| \ll \omega_{21}$); Ω – частота Раби:

$$\Omega = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + \frac{\varepsilon^2}{4\hbar^2}\,|(\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_{12})|^2}. \quad (10)$$

Подстановка волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ в выражение для среднего дипольного момента выделенного атома

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t)\,|\,\mathbf{d}\,|\,\psi(\mathbf{r}, t)\rangle =$$

$$= \langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\,|\,\mathbf{d}\,|\,\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle / \langle \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\, \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)\rangle \quad (11)$$

приводит, при условии, что α значительно меньше единицы, а длительность внешнего воздействия света значительно превосходит величину $\frac{1}{|\gamma_{21}|}$, к выражению

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = [(e\,\mathbf{r}_{12}\, F_n^* \exp(-i\omega t + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) +$$
$$+ e\,\mathbf{r}_{21}\, F_n \exp(i\omega t - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})) +$$
$$+ \frac{\alpha m e}{\hbar}(\mathbf{V}((\mathbf{rr})_{11} + (\mathbf{rr})_{12}\, F_n^* \exp(-i\omega t + i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}) +$$
$$+ (\mathbf{rr})_{21}\, F_n \exp(i\omega t - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) +$$
$$+ (\mathbf{rr})_{22}\,|F_n|^2))]/(1 + |F_n|^2 +$$
$$+ \frac{\alpha m e}{\hbar}\,|(\mathbf{V}\cdot\mathbf{r}_{21})\, F_n|\cos(\omega t - \mathbf{K}\cdot\mathbf{R} + \varphi)). \quad (12)$$

При выводе формулы (12) предполагалось, что вектор $\mathbf{r}_{21}$ параллелен вектору $\mathbf{E}_0$. Величина F_n определяется соотношением

$$F_n = i2\hbar\, \beta_n / e(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}_{12}), \quad (13)$$

где параметр n принимает значения:

$$n = 1 \text{ при } \varepsilon > 0, \gamma_{21} < 0; \varepsilon < 0, \gamma_{21} > 0; \quad (14)$$

$$n = 2 \text{ при } \varepsilon > 0, \gamma_{21} > 0; \varepsilon < 0, \gamma_{21} < 0. \quad (15)$$

Дополнительная фаза φ, введенная в аргумент косинуса, стоящего в знаменателе, определяется соотношениями между $\mathbf{r}_{21}$ и F_n. Кроме того, в (12) введены матричные элементы $(\mathbf{rr})_{ij} = \langle \psi_i\,|\,\mathbf{rr}\,|\,\psi_j \rangle$.

Поляризацию единицы объема можно найти, умножив $\langle \mathbf{d}(t) \rangle$ на концентрацию атомов вблизи точки **R**.

Слагаемое в числителе, пропорциональное α, ответственно в первую очередь за эффекты типа поворота плоскости поляризации рассеиваемого излучения [4] и в данном исследовании нас не интересует. Поэтому в дальнейшем его не будем учитывать. Это дает возможность переписать (12) в виде

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle =$$
$$= \frac{(e\mathbf{r}_{12} F_n^* \exp(-i\omega t + i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}) + e\mathbf{r}_{21} F_n \exp(i\omega t - i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}))}{\left(1 + |F_n|^2 + \frac{2\alpha m}{\hbar}|(\mathbf{V}\cdot\mathbf{r}_{21})\, F_n|\cos(\omega t - \mathbf{K}\cdot\mathbf{R} + \varphi)\right)}. \quad (16)$$

Числитель формулы (16) с точностью до множителя, по порядку величины близкого к единице, описывает индуцированный резонансным излучением дипольный момент отдельного атома [5]. В знаменателе есть дополнительное слагаемое, обусловленное тем, что по предположению рассматриваемый атом находится в анизотропном термостате. Это слагаемое зависит не только от средней скорости дрейфа выделенной системы относительно термостата, но и от параметров внешнего излучения. Разлагая $\langle \mathbf{d}(t) \rangle$ по степеням параметра α

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = \alpha^0 \langle \mathbf{d}(t) \rangle_0 + \alpha^1 \langle \mathbf{d}(t) \rangle_1 + \alpha^2 \langle \mathbf{d}(t) \rangle_2 + ..., \qquad (17)$$

нетрудно заметить, что слагаемые будут содержать гармоники внешнего излучения. Наиболее существенным является $\alpha \langle \mathbf{d}(t) \rangle_1$:

$$\alpha \langle \mathbf{d}(t) \rangle_1 = \alpha \, (e\mathbf{r}_{12} F_n^* \exp(-i\omega t + i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}) +$$

$$+ e\mathbf{r}_{21} F_n \exp(i\omega t - i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}) \, 2m \, |(\mathbf{V}\cdot\mathbf{r}_{21}) F_n| \times$$

$$\times \cos(\omega t - \mathbf{K}\cdot\mathbf{R} + \varphi)/[\hbar (1 + |F_n|^2)^2]. \qquad (18)$$

Как видно, в случае, когда угол между векторами $\mathbf{V}$ и $\mathbf{E}_0$ не равен $\pi/2$, (18) будет отличаться от нуля (величина $\alpha \langle \mathbf{d}(t) \rangle_1$ принимает максимальное значение, когда эти векторы параллельны). А это значит, что в рассеянном излучении должна содержаться электромагнитная волна с удвоенной частотой внешнего излучения. Она должна распространяться в том же направлении, что и внешнее излучение. Амплитуда ее зависит от концентрации атомов, величины параметра α (т.е. от плотности термостата) и скорости $\mathbf{V}$. Поскольку величина индуцированного дипольного момента атома на удвоенной частоте отличается от дипольного момента на основной частоте $\langle \mathbf{d}(t) \rangle_1$ множителем

$$\mu = \alpha \, 2m \, |(\mathbf{V}\cdot\mathbf{r}_{21}) F_n| / [\hbar (1 + |F_n|^2)], \qquad (19)$$

его легко определить.

Подстановка в (19) параметров, близких по порядку величины к реальным, показывает, что для μ справедлива оценка

$$\mu \approx 10^2 \alpha \, |\mathbf{V}|/c. \qquad (20)$$

Согласно (20) в случае, когда термостат достаточно плотен ($\alpha \approx 10^{-3} \div 10^{-2}$), а скорость направленного движения ансамбля возмущающих атом частиц соизмерима со скоростью света, дипольный момент на удвоенной частоте будет близок к «резонансному» значению. Это указывает на то, что процесс удвоения частоты может оказаться весьма заметным, допускающим экспериментальное наблюдение.

1. *Иванов В.Н.* К вопросу о рассеянии нестабильных частиц // Изв. вузов. Физика. Томск, 1986. 13 с. Деп. в ВИНИТИ 20.12.86. № 8176.
2. *Иванов В.Н.* // Изв. вузов. Физика. Томск, 1996. Т. 39. № 2. С. 7–13.
3. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. 382 с.
4. *Ivanov V.N., Tvorogov S.D.* // SPIE. 1993. V. 2205. P. 341–344.
5. *Савельев И.В.* Основы теоретической физики. Т. 2. М.: Наука, 1977. 351 с.

Омский государственный технический университет

Поступила в редакцию
7 октября 1997 г.

V.N. Ivanov. **Generation of the Second Harmonics of Scattered Laser Radiation by Ensemble of Atoms Drifting in Markovian Heat Bath.**

A nonlinear effect is theoretically considered, which can take place in the case, when the ensemble of atoms interacting with light moves in some direction inside Markovian heat bath. Because of anisotropy of the medium inside the heat bath, such atoms obtain an additional multipole moment. The interaction of atoms with external coherent radiation can result in generation of the second harmonic of light.