«Оптика атмосферы», **1**, № 11 (1988) УДК 539.192

В.Н. Иванов

РАССЕЯНИЕ СВЕТА НЕСТАБИЛЬНЫМИ ДВУХУРОВНЕВЫМИ АТОМАМИ

Исследуется взаимодействие неустойчивых атомов с когерентным излучением. Оператор нестабильности атомов задается в виде

$$\hat{V} = -\frac{i\alpha}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2.$$

где $\alpha > 0$ — малый эмпирический параметр. Показано, что при рассеянии резонансного излучения должны наблюдаться нестационарные когерентные явления, такие как затухание оптической нутации. Отмечается, что контур линии рассеяния при достаточно больших напряженностях зондирующего поля должен иметь в центре провал.

Прохождение лазерного излучения через атмосферу при зондировании ее короткими мощными импульсами сопровождается, как известно, целым рядом нелинейных эффектов, таких как оптическая нутация, затухание свободной поляризации и т. д. Однако несмотря на то, что рассеяние лазерного излучения атомами и молекулами изучено довольно подробно [1, 2], в ряде работ [2, 3] отмечены заметные расхождения экспериментальных и теоретических данных. Это указывает на то, что при теоретическом рассмотрении желательно учитывать все факторы, в том числе и те, которые почему-либо казались второстепенными. В этой связи интересно оценить влияние на рассеяние света нестабильности атомов и молекул, находящихся в воздухе.

Такого рода анализ необходим при изучении состояния верхних слоев атмосферы, находящихся под действием жесткого космического излучения, поскольку, если удастся выделить эффекты, обязанные своим появлением распаду атомов, то по изменению с высотой характера рассеяния зондирующего лазерного излучения можно будет судить о глубине проникновения в атмосферу космических лучей. Кажется необходимым этот анализ и при определении степени загрязнения атмосферы вблизи химических производств, например, димерами, время жизни которых ограничено [4].

Для того чтобы теоретически рассмотреть вопрос о взаимодействии атомов и молекул, имеющих малый период полураспада с зондирующим излучением, необходимо задать ту или иную модель нестабильности квантовой системы. Общим в этих моделях является введение в уравнение Шрёдингера оператора, нарушающего эрмитовость гамильтониана [5]. В данной работе для выявления возможных эффектов, обязанных своим происхождением неустойчивости атомов и молекул, в качестве оператора нестабильности используется функционал

$$\hat{V} = -\frac{i\alpha}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2, \tag{1}$$

полученный в квазирелятивистском приближении методом интегралов по траекториям для бесспиновых частиц [6]. (Обозначения стандартны, т. е. $\hat{\boldsymbol{P}}$ — заряд, масса и оператор импульса частицы; $\boldsymbol{A}$ — векторный потенциал поля, c — скорость света). Несмотря на простой вид (в (1) содержится всего один эмпирический, малый по величине параметр α, причем известно, что $\alpha > 0$, и при формальном $c \to \infty$ $\alpha \to 0$), этот оператор «обеспечивает» распад изолированного атома и позволяет учитывать влияние внешнего возмущения на время жизни атома.

Поскольку нас интересует процесс рассеяния света, а в нем чаще всего участвуют внешние электроны, запишем с учетом (1) уравнение Шрёдингера для ψ — волновой функции внешнего электрона атома, находящегося в электромагнитном поле (U — потенциальная энергия):

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{P} - \frac{e}{c}A\right)^2\Psi + U\Psi - \frac{i\alpha}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}A\right)^2\Psi. \tag{2}$$

Учитывая, что в оптическом диапазоне длина волны электромагнитного излучения значительно больше размеров атома, упростим его, перейдя к дипольному и длинноволновому приближению. Для этого воспользуемся стандартной методикой [7] и представим волновую функцию в виде произведения

$$\Psi(\boldsymbol{r},\ t)=\psi(\boldsymbol{r},\ t)\exp\left(-i\frac{e}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},\ t)\cdot\boldsymbol{r}\right),$$

($\boldsymbol{R}$ — координаты атома в лабораторной системе отсчета). Тогда после ряда преобразований получим:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(1-i\alpha)\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{P}}^2\psi+U\psi-\boldsymbol{d}\varepsilon(t)\psi, \tag{3}$$

$\boldsymbol{D}$ — дипольный момент атома; $\varepsilon(t)$ — напряженность внешнего электрического поля. В дальнейшем будем полагать, что падающее излучение — плоская, поляризованная по кругу волна:

$$\varepsilon(t)=\varepsilon(\boldsymbol{e}_x\cos(\omega t)+\boldsymbol{e}_y\sin(\omega t)) \tag{4}$$

(ε — амплитуда, e_x и e_y — единичные орты, ω — частота).

Волновое уравнение (3) позволяет найти состояние нестабильного атома и, как следствие, описать процессы, сопровождающие распространение света. Прежде чем приступить к его решению, положим для простоты, что взаимодействие излучения с атомом имеет резонансный характер, тогда можно ограничиться двухуровневым приближением.

Поскольку для вычисления ψ–функции, удовлетворяющей (3), необходимы волновые функции изолированного атома, определим их, воспользовавшись теорией возмущений:

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_\kappa+\alpha\Delta E_\kappa)t\right][\psi_\kappa(\boldsymbol{r})-\alpha\Delta\psi_\kappa(r)], \tag{5}$$

где $E_к$ и $\psi_к(\boldsymbol{r})$ — величины, характеризующие стабильный атом, и в первом порядке теории возмущений:

$$\Delta E_\kappa=iE_\kappa\left(\frac{U_{\kappa\kappa}}{E_\kappa}-1\right); \tag{6}$$

$$\Delta\psi_\kappa(\boldsymbol{r})+i\sum_{m\neq\kappa}\frac{U_{m\kappa}}{E_\kappa-E_m}\psi_m(\boldsymbol{r}). \tag{7}$$

С целью дальнейшего упрощения допустим, что E_i ($i = 1,2$) — достаточно возбужденные уровни. Тогда, если принять во внимание, что для внешних электронов оператор потенциальной энергии довольно близок к кулоновскому потенциалу, согласно теореме вириала имеем:

$$U_{\kappa\kappa}\approx 2E_\kappa,\ \Delta E_\kappa\approx iE_\kappa. \tag{8}$$

Интересно отметить, что более строгий расчет, проведенный для водородоподобного атома, дает

$$\psi_{nlm}(\rho,\ t)=\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)R_{nl}(\rho)Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \tag{9}$$

где $Y_{im}(\theta, \varphi)$ — обычные угловые функции;

$$R_{nl}(\rho)=N_{nl}\rho^{-l-1}\exp\left[\frac{z\rho}{n(1-i\alpha)}\right]\left\{\rho^{n+l}\exp\left[-\frac{2z\rho}{n(1-i\alpha)}\right]\right\}^{(n-l-1)} \tag{10}$$

(N_{nl} — нормировочная константа), а постоянная разделения равна

$$E_n=-\frac{z^2}{2(1-i\alpha)n^2}. \tag{11}$$

Таким образом, решение уравнения (3) сводится к нахождению коэффициентов $c_к(t)$ в суперпозиции

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=c_1(t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_1(1+i\alpha)t\right]\left(\psi_1+i\alpha\sum_{m\neq1}\frac{U_{m1}}{E_1-E_m}\psi_m\right)+ \tag{12}$$

$$+ c_2(t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_2(1+i\alpha)\,t\right]\left(\psi_2 + i\alpha\sum_{m\neq 2}\frac{U_{m2}}{E_2-E_m}\psi_m\right),$$

а это — стандартная задача для двухуровневой квантовой системы с «радиационным» затуханием заселенности уровней. В точном резонансе ($\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$) искомые коэффициенты удовлетворяют системе уравнений:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial c_1}{\partial t} &= c_2\,\frac{x_{12}-iy_{12}}{2}\,\varepsilon\exp(\alpha\omega t);\\ i\hbar\frac{\partial c_2}{\partial t} &= c_1\,\frac{x_{21}+iy_{21}}{2}\,\varepsilon\exp(-\alpha\omega t)\end{aligned} \tag{13}$$

(x_{ik}, y_{ik} — проекции матричных элементов дипольного момента на оси x и y). Откуда в зависимости от начального состояния атома следует:

$$\begin{aligned} c_1(t) &= [\gamma_2\exp(\gamma_1 t) - \gamma_1\exp(\gamma_2 t)]/(\gamma_2-\gamma_1);\\ c_2(t) &= \varepsilon(x_{21}+iy_{21})\,[\exp(-\gamma_1 t) - \exp(-\gamma_2 t)]/[2i\hbar(\gamma_2-\gamma_1)]\end{aligned} \tag{14}$$

(атом находится на нижнем (энергия равна E_1) уровне);

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \varepsilon(x_{12}-iy_{12})\,[\exp(\gamma_2 t) - \exp(\gamma_1 t)]/[2i\hbar(\gamma_2-\gamma_1)];\\ c_2(t) &= [\gamma_2\exp(-\gamma_1 t) - \gamma_1\exp(-\gamma_2 t)]/(\gamma_2-\gamma_1)\end{aligned} \tag{15}$$

(атом первоначально возбужден).

В (14, 15) введено обозначение:

$$\gamma_{12} = \frac{\alpha\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha\omega}{2}\right)^2 - \frac{\varepsilon^2}{4\hbar^2}\left(|x_{21}|^2 + |y_{21}|^2 + 2\,\mathrm{Im}\,(x_{21}y_{12}\right)} = \frac{\alpha\omega}{2} \pm B. \tag{16}$$

Найденные соотношения позволяют записать функцию состояния нестабильного атома в любой момент времени, и, следовательно, у нас появляется возможность рассмотреть в полуклассическом приближении динамику его излучения.

Так как в оптическом диапазоне частот $|\alpha(E_1+E_2)/\hbar| \ll \omega$, то, очевидно, интенсивность рассеянного света $I(t)$ будет определяться величиной дипольного момента, который в зависимости от напряженности внешнего поля равен или

$$\begin{aligned} <d(t)> = \frac{|x_{21}|^2\varepsilon}{2B^2\hbar}\exp\left(\alpha\frac{E_1+E_2}{\hbar}t\right)\{\alpha\omega - [\gamma_1\exp(\mp 2Bt) + \\ + \gamma_2\exp(\pm 2Bt)]\}\,\{\boldsymbol{e}_y\cos(\omega t) - \boldsymbol{e}_x\sin(\omega t)\}\end{aligned} \tag{17}$$

(B — действительное число), или

$$\begin{aligned} <d(t)> = \frac{|x_{21}|^2\varepsilon}{2K^2\hbar}\exp\left(\alpha\frac{E_1+E_2}{\hbar}t\right)\{\alpha\omega\cos(2Kt) \pm \\ \pm 2K\sin(2Kt) - \alpha\omega\}\,\{\boldsymbol{e}_y\cos(\omega t) - \boldsymbol{e}_x\sin(\omega t)\}\end{aligned} \tag{18}$$

(B — мнимое число; $K = -iB$). Учитывая это, запишем, усредняя по периоду электромагнитных колебаний:

$$I_1(t) = \kappa_1\{[(\alpha\omega)^2 + 2\delta^2] - 4\alpha\omega\delta\,\mathrm{ch}\,(2Bt \mp \beta_1) + 2\delta^2\,\mathrm{ch}\,(4Bt \mp 2\beta_1)\}\exp\left(2\alpha\frac{E_1+E_2}{\hbar}t\right) \tag{19}$$

и

$$I_2(t) = \kappa_1\{[(\alpha\omega)^2 + 2\delta^2] - 4\alpha\omega\delta\cos(2Kt \mp \beta_2) + 2\delta^2\cos(4Kt \mp 2\beta_2)\}\exp\left(2\alpha\frac{E_1+E_2}{\hbar}t\right), \tag{20}$$

где κ_1 — известная величина, зависящая от свойств атома, амплитуды поля, направления рассеяния;

$$\delta = \left[\frac{\varepsilon^2}{4\hbar^2}\left(|x_{21}|^2 + |y_{21}|^2 + 2\,\mathrm{Im}\,(x_{21}y_{12})\right)\right]^{1/2};$$

$$\beta_1 = \mathrm{Ar\,sh}\,(B/\delta); \quad \beta_2 = \arcsin\,(K/\delta).$$

В формулах (17—20) верхний знак соответствует случаю, когда $c_\kappa(t)$ вычисляются с помощью (14), нижний — (15).

Анализ выражений (19, 20) показывает, что, как и следовало ожидать, в системе неустойчивых атомов должны существовать при их взаимодействии со светом нестационарные когерентные явления, имеющие место и для стабильных атомов — оптическая нутация, затухание свободной поляризации и т.д. Отметим здесь одно обстоятельство: как явствует из полученных выше формул, время затухания оптической нутации равно времени затухания свободной поляризации, что совпадает с экспериментальными данными [2], полученными для веществ, которые трудно отнести к стабильным. Здесь же заметим, что, возможно, именно нестабильностью молекул объясняется и большее (нежели расчетное) значение напряженности поля в лазерном излучении, необходимое для наблюдения оптической нутации [2]. Представляет интерес спектральное распределение интенсивности рассеянного излучения, которое равно (теперь отказываемся от точного резонанса и $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ с $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$):

$$I_1(\Delta\omega) = \kappa_2 \frac{\Delta\omega^2 + (\gamma \mp \alpha\omega)^2}{(\Delta\omega^2 + \gamma^2)\,[\Delta\omega^2 + (\gamma + 2B)^2]\,[\Delta\omega^2 + (\gamma - 2B)^2]} \tag{21}$$

$$I_2(\Delta\omega) = \kappa_2 \frac{\Delta\omega^2 + (\gamma \mp \alpha\omega)^2}{(\Delta\omega^2 + \gamma^2)\,[(\Delta\omega + 2K)^2 + \gamma^2]\,[(\Delta\omega - 2K)^2 + \gamma^2]} \tag{22}$$

$$\left(\kappa_2 = \mathrm{sonst};\ \gamma = -\alpha\,\frac{E_1 + E_2}{\hbar}\right).$$

Как видно из приведенных формул, контур спектральной линии существенно отличается от дисперсионного, причем его форма зависит как от напряженности зондирующего излучения, так и от того, на каком уровне находится атом. Любопытно, что при $\delta^2 \gg (\alpha\omega/2)^2$ независимо от первоначального состояния атома регистрируемый контур должен иметь в центре провал. В тех случаях, когда $\delta^2 \ll (\alpha\omega/2)^2$, распределение интенсивности в линии рассеяния определяется соотношениями

$$I_1(\Delta\omega) = \kappa_2/(\Delta\omega^2 + \gamma^2)\,[\Delta\omega^2 + (\gamma - \alpha\omega)^2], \quad (c_2(0) = 1); \tag{23}$$

$$I_2(\Delta\omega) = \kappa_2/(\Delta\omega^2 + \gamma^2)\,[\Delta\omega^2 + (\gamma + \alpha\omega)^2], \quad (c_1(0) = 1), \tag{24}$$

из которых следует, что для возбужденного атома полуширина контура рассеяния может быть значительно меньше полуширины линии, рассеиваемой атомом, находящимся на нижнем уровне. Вообще же, как показывают оценки, для атомов, находящихся внизу, полуширина контура при $\delta^2 < (\alpha\omega/2)^2$ меняется незначительно и начинает быстро расти при $\delta^2 > (\alpha\omega/2)^2$.

Подводя итог, отметим, что проведенное выше рассмотрение является неполным. В частности, мы не учитывали спонтанные переходы. Однако полученные результаты могут быть легко обобщены. В целом же, как уже отмечалось, можно сделать вывод о том, что именно нестабильность атомов и молекул является одной из причин количественного расхождения между экспериментальными и теоретическими данными, полученными при изучении процессов рассеяния лазерного излучения веществом.

В заключение автор выражает благодарность профессору С.Д. Творогову за полезные обсуждения.

1. Раутиан С.Г., Смирнов Г.И., Шалагин А.М. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул. Новосибирск: Наука. 1979. 308 с.
2. Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М.: Мир. 1978. 220 с.
3. Апаносевич П.А., Килин С.Я., Низовцев А.П. //Журнал прикладной спектроскопии. 1987. Т. 47. № 6. С. 887.
4. Carnovale Frank, Peel J. Barrie, Rothwell Richard G. //J. Chem. Phys. 1986. V. 85. № 11. p. 6261.
5. Экснер П. //Физ. элементарных частиц и атомного ядра. 1984. Т. 15. № 1. С. 121.
6. Иванов В.Н. К вопросу о рассеянии нестабильных частиц. Деп. в ВИНИТИ. Рег. № 8176-В86.

7. А р е к к и Ф . , С к а л л и М . , Х а к е н Г . , В а й д л и х В . Квантовые флуктуации излучения лазера. М.: Мир. 1974. С. 236.

Омский госуниверситет

Поступила в редакцию
29 февраля 1988 г.

V . N . I v a n o v . **Unstable two-levels atom light scattering.**

Unstable atoms and coherent light interaction is investigated. The operator of atom instability is given in the form

$$\hat{V} = -\frac{i\alpha}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2.$$

where $\alpha > 0$ is the small phenomenological parameter. It was shown that the optical nutation damping as well as the other nonsteady coherence phenomena induced by the resonance of light must be observed.