



Издательский Дом
ИНТЕЛЛЕКТ

В. А. АСТАПЕНКО

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
ИЗЛУЧЕНИЯ С АТОМАМИ
И НАНОЧАСТИЦАМИ**

В. А. АСТАПЕНКО

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С АТОМАМИ И НАНОЧАСТИЦАМИ



ДОЛГОПРУДНЫЙ
2010

В.А. Астапенко

Взаимодействие излучения с атомами и наночастицами: Учебное пособие / В.А. Астапенко – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 496 с.

ISBN 978-5-91559-083-9

Учебник посвящен систематическому изложению физики основных элементарных процессов, возникающих при взаимодействии электромагнитного поля с атомами и наночастицами. Рассмотрены такие фундаментальные явления как поглощение излучения, люминесценция, индуцированное излучение, фотоионизация, тормозное излучение, включая поляризационный канал, различные виды рассеяния фотона на атомах и мезообъектах, в том числе с участием поверхностных плазмонов, а также фотопереходы в молекулярных системах и наноструктурах. Когерентные нестационарные процессы – самоиндуцированная прозрачность, оптическая нутация и фотонное эхо – описаны в рамках формализма вектора Блоха, позволяющего дать их наглядную геометрическую интерпретацию.

Основному материалу предпослано рассмотрение электромагнитного взаимодействия на примере простейших классических систем – гармонического осциллятора и осциллятора Морзе. Особое внимание уделено фазовому контролю фотовозбуждения классического осциллятора в поле ультракоротких импульсов и в бихроматическом поле, играющему важную роль в современной лазерной физике и химии.

Представлено классическое описание взаимодействия электромагнитного излучения с веществом на основе спектроскопического принципа соответствия, включая вывод выражений для коэффициентов Эйнштейна. Подробно рассмотрена динамическая поляризуемость атома – величина, занимающая центральное место в описании отклика вещества на электромагнитное воздействие.

Рассмотрены неупругие процессы при взаимодействии электронов с атомными частицами.

Для студентов и преподавателей, научных работников в областях атомной физики и фотоники.

ISBN 978-5-91559-083-9

© 2010, В.А. Астапенко

© 2010, ООО Издательский Дом

«Интеллект», оригинал-макет,
оформление

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	7
--------------------------	---

Глава 1 ОСЦИЛЛЯТОР В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ	11
---	----

1.1. Гармонический осциллятор в монохроматическом поле	12
1.2. Гармонический осциллятор в поле электромагнитного импульса	20
1.3. Гармонический осциллятор в поле теплового излучения	31
1.4. Осциллятор Морзе в электромагнитном поле	35
1.5. Возбуждение гармонического осциллятора при столкновении с заряженной частицей	47
Приложение 1	54
Приложение 2	56
<i>Литература</i>	58

Глава 2 ТЕОРИЯ ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ	59
--	----

2.1. Квантование энергии вещества и теория теплового излучения М. Планка	59
2.2. Вывод формулы для спектра теплового излучения на основании квантования энергии электромагнитного поля	67
2.3. Квантование гармонического осциллятора	73
2.4. Каноническое квантование электромагнитного поля	80
2.5. Когерентные состояния электромагнитного поля	92
<i>Литература</i>	103

**Глава 3****ФОТОЭФФЕКТ И ЭФФЕКТ КОМПТОНА** 104

3.1. Фотоэффект 104

3.2. Эффект Комптона 113

Литература 122**Глава 4****ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ:****ОПИСАНИЕ В РАМКАХ ПРИНЦИПА СООТВЕТСТВИЯ** 123

4.1. Двухуровневая система в поле теплового излучения 123

4.2. Полуклассическая теория Бора 125

4.3. Спектроскопический принцип соответствия и сила осциллятора 133

4.4. Классический вывод выражений для коэффициентов Эйнштейна 142

4.5. Спектральная форма линии атомного перехода 146

4.6. Сечение радиационного перехода 156

4.7. Балансные уравнения и динамика лазерной генерации 161

Литература 176**Глава 5****ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМОВ****И НАНОЧАСТИЦ** 177

5.1. Определение динамической дипольной поляризуемости 177

5.2. Динамическая поляризуемость атома 179

5.3. Общие соотношения для динамической поляризуемости 183

5.4. Поляризуемость водородоподобного атома (иона) 187

5.5. Статическая поляризуемость атомов и ионов 190

5.6. Модель локальной плазменной частоты для поляризуемости многоэлектронных систем 191

5.7. Динамическая поляризуемость наночастиц 196

Литература 201**Глава 6****ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ДИСКРЕТНОМ****СПЕКТРЕ** 202

6.1. Введение в квантовую теорию атома 202



6.2. Теория возмущений	207
6.3. Фотопроцессы в монохроматическом поле	210
6.4. Наномаркеры на квантовых точках	217
6.5. Двух- и многофотонные процессы	223
6.6. Двухуровневая система в резонансном поле	232
6.7. Фотовозбуждение вещества ультракороткими электромагнитными импульсами	236
<i>Литература</i>	248
Глава 7	
ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ СВЯЗАННО-СВОБОДНЫХ ПЕРЕХОДАХ	249
7.1. Фотоионизация и фотоотрыв в пертурбативном режиме	249
7.2. Фотоионизация атомов в сильном лазерном поле	273
<i>Литература</i>	290
Глава 8	
РАСSEЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ НА АТОМАХ, ПЛАЗМЕ И НАНОЧАСТИЦАХ	291
8.1. Рассеяние фотона на свободном электроне	291
8.2. Рассеяние излучения на атоме	294
8.3. Рассеяние высокочастотного излучения на атоме	306
8.4. Рассеяние излучения в плазме	317
8.5. Рассеяние и поглощение излучения на наночастицах	326
<i>Литература</i>	343
Глава 9	
КОГЕРЕНТНЫЕ ФОТОПРОЦЕССЫ	344
9.1. Формализм оптического вектора Блоха и простейшие когерентные явления	344
9.2. Уширение линии спектроскопического перехода и «выжигание провалов»	355
9.3. Затухание свободной поляризации и фотонное эхо	369
9.4. Фемтосекундное фотонное эхо на нанокристаллах	377
9.5. Фазовые эффекты при фотовозбуждении вещества мощными ультракороткими импульсами	382
<i>Литература</i>	389

**Глава 10****ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ** 390

- 10.1. Двухфотонные процессы в бихроматическом поле 390
- 10.2. Фазовый контроль в бихроматическом поле 394
- 10.3. Эксперименты по фазовому контролю 401
- 10.4. Бихроматическое возбуждение атомов в электрическом поле 408
- Литература* 416

Глава 11**СТОЛКНОВИТЕЛЬНО-ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ** 417

- 11.1. Два канала тормозного излучения на атоме 417
- 11.2. Вынужденный тормозной эффект 429
- 11.3. Резонансный тормозной эффект 437
- 11.4. Излучение релятивистских частиц на атомных кластерах 445
- 11.5. Поляризационное тормозное излучение на металлических наночастицах 457
- Литература* 466

Глава 12**ИОНИЗАЦИЯ И ВОЗБУЖДЕНИЕ АТОМОВ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ** 467

- 12.1. Формула Томсона 467
- 12.2. Метод функции подобия для сечения ионизации 469
- 12.3. Сравнение с экспериментальными данными 473
- 12.4. Классическое рассмотрение ударного возбуждения атома 478
- 12.5. Метод функции подобия для ударного возбуждения атома 485
- 12.6. Возбуждение дипольно-запрещенных переходов в атомах 488
- Литература* 492

ПРЕДИСЛОВИЕ

Книга, предлагаемая читателю, написана на основании трех источников. Это, во-первых, опыт более чем 20-летнего преподавания физики излучательных процессов в Московском физико-техническом институте как на факультете физической и квантовой электроники, так, частично, на факультете молекулярной и химической физики. Вторым источником является научная работа автора по исследованию широкого круга явлений, так или иначе связанных с взаимодействием электромагнитного поля и вещества: от поляризационного тормозного излучения на атоме и фотонного эха на нанокристаллах до рассеяния света на наночастицах и фазовых эффектов при возбуждении атомов и нанобъектов ультракороткими лазерными импульсами. Наконец, третьим источником является опыт прикладного использования теории элементарных электрон- и фотон-атомных взаимодействий при выполнении ряда наукоемких коммерческих проектов. Последнее относится в первую очередь к материалу гл. 12, в которой рассматриваются ионизация и возбуждение атомов электронным ударом.

Логика отбора материала в значительной мере определялась характером вышеперечисленных источников. Здесь в первую очередь играла роль значимость рассматриваемых процессов для создания у обучающегося необходимого фундамента для качественного понимания физики излучательных процессов и способов их количественного описания. Другим определяющим критерием был личный опыт автора в исследовании изучаемых явлений. Наконец еще одно важное обстоятельство, влиявшее на отбор материала, — это степень актуальности рассматриваемых процессов с точки зрения их современных технологических применений в частности в нанопотонике и наноплазмонике, а также в физике сверхбыстрых процессов и сверхсильных полей.



Стиль изложения определялся спецификой рассматриваемых вопросов. Так, например, процессам, исследование которых послужило толчком к созданию современной физики электромагнитного поля (тепловое излучение, фотоэффект, эффект Комптона), дано в первых главах оригинальное, исторически первое описание, а в последующих разделах представлена их современная трактовка в рамках последовательной теории. Значительное внимание в книге уделено спектроскопическому принципу соответствия, позволяющему провести широкую аналогию между классической и квантовой физикой, получить в ряде случаев выражения для ключевых физических величин (коэффициентов Эйнштейна, сил осцилляторов и т. д.) с использованием арсенала понятий классической физики.

В книге сочетается изложение простых, но важных для понимания всего материала вопросов, и довольно сложного формализма современной квантовой физики. Так, в первой главе дается элементарная теория классического (линейного и нелинейного) заряженного осциллятора в электромагнитном поле, которая служит через вышеупомянутый принцип соответствия основой для дальнейшего изложения. При этом впервые, насколько это известно автору, рассматриваются особенности свободных колебаний классического осциллятора Морзе, являющегося важной моделью в теории двухатомных молекул. Во второй главе представлена квантовая теория осциллятора и электромагнитного поля, включая формализм когерентных состояний, играющих существенную роль в квантовой оптике и квантовой информатике.

Характерная особенность настоящего учебника состоит в том, что в нем, наряду с изложением строгой квантовой теории электромагнитных процессов, заметное внимание уделено ряду качественных моделей, позволяющих получать адекватное описание, апеллируя в большей степени к соображениям физической интуиции, нежели к математическому формализму. Отличительной особенностью излагаемых подходов является широкое использование качественных аналогий, позволяющее переносить приемы и методы, развитые для расчета одних процессов, на исследование других, часто слабоизученных явлений. Примером такого рода моделей является приближение локальной плазменной частоты, используемое в расчетах сечения фотопоглощения на многоэлектронных системах и динамической поляризуемости атомов. В этом ряду стоит также модель Борна—Комптона в теории ионизации атома электронным



ударом, которая была предложена автором на основании аналогии между ударной ионизацией и комптоновским рассеянием рентгеновских лучей. Важное место уделено формализму оптического вектора Блоха, который дает наглядную геометрическую интерпретацию когерентных радиационных процессов, позволяя представить временную эволюцию квантовой системы под действием излучения как вращение трехмерного вектора, изображающего состояние системы.

Таким образом, качественное понимание электромагнитных взаимодействий достигается как с помощью использования интуитивных моделей, так и на основании применения наглядного математического формализма.

Другая особенность данной книги, отличающая ее от стандартных учебников по теории излучательных процессов, связана с сочетанием изложения хорошо известных подходов и новых методов описания, некоторые из которых были разработаны автором в связи с современными возможностями эксперимента. Здесь в первую очередь нужно упомянуть простое аналитическое выражение для полной вероятности фотопроцесса в поле ультракороткого электромагнитного импульса, которое позволяет описывать явление в той ситуации, когда стандартный подход, основанный на понятии интенсивности излучения и вероятности процесса в единицу времени, становится неадекватным. Полученное выражение можно назвать аналогом золотого правила Ферми в физике сверхбыстрых электромагнитных явлений.

Наряду с традиционными вопросами физики электромагнитных взаимодействий, в книге рассматривается ряд фотопроцессов, отвечающих современному этапу развития науки и техники, перспективных с точки зрения использования в новейших технологиях. К этим явлениям относятся: фотонное эхо на нанокристаллах, рассеяние излучения на металлических сферах в области плазмонного резонанса, поляризационное тормозное излучение на кластерах, резонансный поляризационный тормозной эффект, фазовый контроль фотоиндуцированных процессов в поле ультракоротких импульсов и в бихроматическом поле, фотоионизация атомов в сверхсильных полях.

Помимо необходимого теоретического материала, в книге приводится описание экспериментов по когерентному фазовому контролю возбуждения вещества в бихроматическом лазерном поле, включая двухканальное возбуждение квантовых ям в полупроводниковых



структурах. Приведенные эксперименты демонстрируют перспективность фазового метода управления вероятностью излучательных явлений. Одно из важных преимуществ фазового контроля светоиндуцированных процессов по сравнению с традиционным методом, основанным на изменении интенсивности излучения, связано с тем, что управляющее воздействие, изменяющее относительную фазу, не требует значительных затрат энергии. Кроме того, к настоящему времени развиты высокоточные методы изменения и стабилизации фазы лазерного излучения, что существенно при практической реализации когерентного контроля в бихроматическом поле и в поле ультракоротких электромагнитных импульсов.

Изложенные в книге сведения носят, с одной стороны, учебно-методический, а с другой — прикладной характер, сочетая интуитивные соображения, последовательную теорию и простые расчетные формулы. В этой связи можно надеяться, что предлагаемая книга будет полезной как для более глубокого усвоения физической сути рассматриваемых процессов, так и для практического использования приведенных формул в конкретных расчетах.

Книга предназначена для широкого круга читателей, включающего в себя студентов соответствующих специальностей, аспирантов и научных сотрудников, преподавателей высшей школы и просто лиц, интересующихся физикой электромагнитных взаимодействий. Автор полагает, что представители каждой из вышеперечисленных групп найдут для себя полезный материал, отвечающий их запросам, научным или педагогическим интересам и квалификации.

Модель гармонического осциллятора широко используется в самых различных областях физики. Это связано в первую очередь с тем, что при малых отклонениях от положения равновесия x_0 потенциальная энергия системы $U(x)$ приближенно описывается квадратичной зависимостью от координаты x . Квадратичная зависимость потенциальной энергии является характерной чертой гармонического осциллятора. Действительно, в положении равновесия сила f , действующая на частицу, равна нулю. Так как сила определяется первой производной потенциальной энергии по координате ($f = -U'_x$), линейный член в разложении потенциальной энергии по отклонению от положения равновесия ($x - x_0$) тоже равен нулю, и остается квадратичная зависимость:

$$U(x \approx x_0) \cong U(x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dx^2} (x - x_0)^2. \quad (1.1)$$

В силу произвольности выбора начала отсчета потенциальной энергии можно положить, что потенциальная энергия системы в точке равновесия равна нулю: $U(x_0) = 0$. Как известно, полная энергия гармонического осциллятора, равная сумме кинетической и потенциальной энергий, имеет вид (для простоты рассматриваем одномерный случай):

$$E = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega_0^2 (x - x_0)^2}{2}, \quad (1.2)$$

где \dot{x} — скорость; m — масса; ω_0 — собственная частота осциллятора. Сравнивая потенциальную энергию гармонического осциллято-



ра [второе слагаемое в правой части равенства (1.2)] с правой частью разложения (1.1), приходим к соотношению:

$$\omega_0 = \sqrt{U''_{x^2} \frac{x_0}{m}}, \quad (1.3)$$

где двумя штрихами обозначена вторая производная потенциальной энергии по координате. Предполагается, что

$$U''_{x^2}(x_0) \neq 0.$$

Таким образом, каждой физической системе при малых отклонениях от положения равновесия можно поставить в соответствие гармонический осциллятор, собственная частота которого в одномерном случае определяется равенством (1.3).

Модель гармонического осциллятора широко используется в физике колебательных процессов. Она может быть применена также для описания квантовых переходов электронов под действием электромагнитного поля между стационарными состояниями в различных физических системах, если воспользоваться спектроскопическим принципом соответствия (см. гл. 4).

1.1. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В МОНОХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Рассмотрим сначала простейший случай взаимодействия заряженного гармонического осциллятора с электрическим полем монохроматической электромагнитной волны. В дальнейшем будем предполагать, что длина волны λ много больше размеров осциллятора a :

$$\lambda \gg a. \quad (1.4)$$

Неравенство (1.4) является условием применимости *дипольного приближения*, играющего важную роль в физике электромагнитных процессов. Легко убедиться, что соотношение (1.4) справедливо в широком диапазоне длин волн, если речь идет о взаимодействии излучения с атомными частицами, характерный размер которых определяется боровским радиусом: $a \approx a_B \cong 0,53 \text{ \AA}$ (напомним, что



1 Å = 10⁻⁸ см). Радиус Бора в рамках классической картины определяет размер ближайшей к ядру орбиты электрона в атоме водорода.

При выполнении условия (1.4) можно пренебречь зависимостью электромагнитного поля от координаты и в монохроматическом случае использовать для напряженности электрического поля выражение:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (1.5)$$

где E_0 , ω , φ_0 — амплитуда, частота и начальная фаза электрического поля. Монохроматическое поле характеризуется тем, что его амплитуда и начальная фаза являются постоянными величинами. Амплитуда электрического поля определяет среднее за период

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

значение интенсивности излучения в вакууме согласно равенству:

$$I = c \frac{E_0^2}{8\pi}, \quad (1.6)$$

где c — скорость света в вакууме. Напомним, что интенсивность представляет собой количество энергии излучения, проходящей через единицу площади в единицу времени, и обычно измеряется в ваттах на квадратный сантиметр.

В атомной физике для количественной характеристики электрического поля в качестве эталонной величины используется атомная напряженность E_a , равная напряженности на первой боровской орбите атома водорода:

$$E_a = \frac{m_e^2 e^5}{\hbar^4} \cong 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см}, \quad (1.7)$$

где m_e — масса электрона. В соответствии с формулой (1.6) атомной напряженности электрического поля (1.7) отвечает атомная интенсивность излучения:

$$I_a = c \frac{E_a^2}{8\pi} = \frac{m_e^4 e^{10} c}{8\pi \hbar^8} \cong 3,52 \cdot 10^{16} \text{ Вт/см}^2. \quad (1.8)$$



Приближение гармонического осциллятора при описании взаимодействия излучения с атомными частицами справедливо для достаточно малых амплитуд электрического поля и интенсивностей излучения:

$$E \ll E_a, \quad I \ll I_a. \quad (1.9)$$

При выполнении неравенств (1.9) влияние излучения на атомные электроны можно считать слабым возмущением.

В дипольном приближении (1.4) уравнение, описывающее колебания заряженного осциллятора под действием электрического поля $E(t)$, имеет вид

$$\ddot{x} + 2\delta_0 \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E(t), \quad (1.10)$$

где x — отклонение координаты осциллятора от положения равновесия; e , m , ω_0 , δ_0 — заряд, масса, собственная частота и константа затухания осциллятора, точки обозначают дифференцирование по времени. Константа δ_0 определяет время затухания свободных колебаний осциллятора:

$$T_2 = \frac{1}{\delta_0}.$$

Время T_2 называется временем фазовой или поперечной релаксации. Оно играет важную роль в физике электромагнитного взаимодействия, определяя, в частности, ширину спектра поглощения излучения ансамблем осциллятором с одинаковой собственной частотой (см. разд. 4.5).

Уравнение (1.10) несложно решить, перейдя от величин, зависящих от времени, к их Фурье-образам, т. е. величинам, зависящим от частоты. Фурье-образ произвольной функции времени $f(t)$ определяется равенством:

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(i\omega t) dt. \quad (1.11)$$

Удобство использования Фурье-образов заключается в том, что дифференцирование по времени после преобразования (1.11) сводится к умножению на фактор $-i\omega$, а интегрирование — к делению



на него. В результате дифференциальное уравнение (1.10) становится алгебраическим, и для Фурье-образа координаты получаем

$$x(\omega) = \frac{e}{m} \frac{E(\omega)}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\delta_0}. \quad (1.12)$$

Обратное преобразование Фурье от правой части равенства (1.12)

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \exp(-i\omega t) \frac{d\omega}{2\pi} \quad (1.13)$$

дает временную зависимость колебаний осциллятора:

$$x(t) = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E(\omega') \exp(-i\omega' t) d\omega'}{\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_0} \frac{d\omega'}{2\pi}. \quad (1.14)$$

Результат вычисления интеграла в выражении (1.14) зависит, естественно, от явного вида функции $E(\omega')$. Для монохроматического поля Фурье-образ от напряженности (1.5) дается формулой:

$$E(\omega') = \pi E_0 [\exp(i\varphi_0) \delta(\omega' - \omega) + \exp(-i\varphi_0) \delta(\omega' + \omega)], \quad (1.15)$$

где $\delta(\omega)$ — дельта-функция Дирака. Как видно из выражения (1.15), в случае монохроматического поля Фурье-образ напряженности содержит две частоты $\omega' = \pm\omega$. Можно показать, что положительная частота отвечает процессам поглощения излучения, а отрицательная частота ответственна за излучение электромагнитных волн.

Подстановка (1.15) в (1.14) после элементарных алгебраических преобразований приводит к следующему выражению для вынужденных колебаний гармонического осциллятора под действием монохроматического поля:

$$x(t) = s(\omega) \cos(\omega t + \varphi_0) + q(\omega) \sin(\omega t + \varphi_0), \quad (1.16)$$

функции $s(\omega)$ и $q(\omega)$ определены выражениями:

$$s(\omega) = x_0 \frac{\omega_0^2 (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4(\omega\delta_0)^2} \approx \frac{x_0}{2} \frac{(\omega_0 - \omega) \omega_0}{(\omega_0 - \omega)^2 + \delta_0^2}; \quad (1.17)$$

$$q(\omega) = x_0 \frac{2\omega\omega_0^2\delta_0}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4(\omega\delta_0)^2} \approx \frac{x_0}{2} \frac{\delta_0\omega_0}{(\omega_0 - \omega)^2 + \delta_0^2}, \quad (1.18)$$



где x_0 — амплитуда колебаний свободного заряда в монохроматическом поле амплитуды E_0 и частоты ω_0 ,

$$x_0 = \frac{eE_0}{m\omega_0^2}.$$

Приближенные равенства в формулах (1.17) и (1.18) записаны для случая малой отстройки частоты излучения от собственной частоты осциллятора, когда

$$|\omega - \omega_0| \leq \delta_0 \ll \omega. \quad (1.19)$$

Это соотношение является условием резонанса электрическим полем и гармоническим осциллятором, сильное неравенство здесь отбрасывает осциллятору с малым затуханием.

Из формулы (1.16) следует, что вынужденные колебания осциллятора содержат *синфазную* электрическому полю составляющую с амплитудой (1.17), и *квадратурную* часть с амплитудой (1.18), сдвинутую на 90° по отношению к фазе поля (1.5). Видно, что синфазная амплитуда на резонансной частоте $\omega = \omega_0$ равна нулю, а квадратурная амплитуда принимает максимальное значение, пропорциональное отношению ω_0/δ_0 .

Таким образом, в точном резонансе (при наличии затухания) вынужденные колебания гармонического осциллятора сдвинуты по фазе на 90° по отношению к фазе возбуждающего монохроматического поля. Амплитуда колебаний при этом обратно пропорциональна константе затухания осциллятора и не зависит от начальной фазы поля φ_0 .

В случае вынужденных колебаний *свободного* заряда, когда собственная частота равна нулю, из формул (1.17), (1.18) в пренебрежении затуханием следует, что $s = eE_0/m\omega^2$ и $q = 0$. Итак, свободный заряд (без затухания) колеблется в *противофазе* с вызывающим колебания полем. Этим, в частности, объясняется отражение электромагнитных волн от поверхности проводника, если их частота меньше плазменной частоты, характеризующей коллективные свойства электронной плотности. Учет затухания в случае свободного заряда приводит к появлению квадратурной составляющей, пропорциональной отношению δ_0/ω .

Важно подчеркнуть, что квадратурная амплитуда колебаний определяет среднюю по периоду электромагнитной волны ($T = 2\pi/\omega$)

мощность $\langle P \rangle_T$ обмена энергией между полем и осциллятором, которая по определению равна

$$\langle P \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T e \dot{x}(t) E(t) dt. \quad (1.20)$$

Подставляя (1.16) в (1.19), с учетом того, что

$$\langle \cos^2(\omega t + \varphi_0) \rangle_T = \frac{1}{2},$$

находим

$$\langle P \rangle_T = \frac{eE_0}{2} \omega q(\omega), \quad (1.21)$$

т. е. действительно мощность обмена энергией между полем и осциллятором определяется квадратурной составляющей вынужденных колебаний (1.18). Вклад синфазной амплитуды в мощность исчезает после усреднения по периоду колебаний электрического поля, поскольку:

$$\langle \cos(\omega t + \varphi_0) \sin(\omega t + \varphi_0) \rangle_T = 0.$$

В рассматриваемом случае мощность электромагнитного взаимодействия положительна $\langle P \rangle_T > 0$, т. е. энергия излучения *поглощается* осциллятором и расходуется на потери, связанные с затуханием его колебаний.

Синфазная амплитуда вынужденных колебаний не участвует в обмене энергией с излучением, но также играет важную роль, поскольку определяет величину показателя преломления вещества. В отсутствие затухания ($\delta_0 = 0$), когда квадратурная амплитуда равна нулю, выражение для вынужденных колебаний гармонического осциллятора в монохроматическом поле упрощается к виду:

$$x(t, \delta_0 = 0) = \frac{eE_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos(\omega t + \varphi_0). \quad (1.22)$$

Отсюда следует, что в низкочастотном диапазоне $\omega < \omega_0$ осциллятор колеблется в фазе с полем электромагнитной волны (1.5). При переходе через резонанс на частотах $\omega > \omega_0$ осциллятор на-



чинает колебаться в противофазе с внешним электрическим полем. С этим фактом связано появление отрицательных значений диэлектрической и магнитной проницаемостей вещества, что используется для создания метаматериалов с отрицательным преломлением.

Графики синфазной и квадратурной амплитуд колебаний гармонического осциллятора в монохроматическом поле представлены на рис. 1.1.

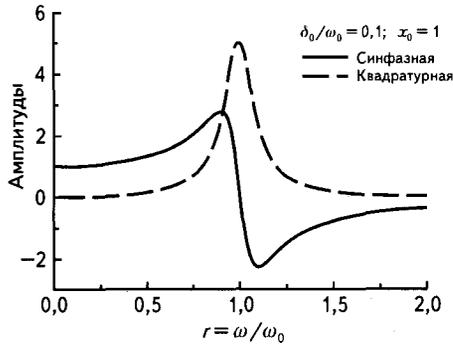


Рис. 1.1. Синфазная и квадратурная амплитуды вынужденных колебаний гармонического осциллятора в монохроматическом поле как функции отношения частот $r = \omega / \omega_0$ для $\delta_0 / \omega_0 = 0,1$ и $x_0 = 1$

Видно, что квадратурная амплитуда всюду положительная, а синфазная — меняет знак при переходе через резонанс. С уменьшением константы затухания максимальные значения амплитуд возрастают, а ширина максимумов при этом уменьшается. Как следует из формулы (1.18), спектральная ширина квадратурной амплитуды равна δ_0 . Это означает, что эффективное возбуждение гармонического осциллятора монохроматическим полем происходит в спектральном диапазоне $(\omega_0 - \delta_0, \omega_0 + \delta_0)$.

Выражение (1.14) можно преобразовать в интеграл по времени, если поменять порядок интегрирования по частоте и по времени в определении Фурье-образа поля. В результате приходим к следующему равенству

$$x(t) = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt' G(t-t') E(t'), \quad (1.23)$$



где $G(t)$ — функция отклика гармонического осциллятора на воздействие электрического поля, которая также называется функцией Грина,

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i\omega'\tau)}{\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_0} \frac{d\omega'}{2\pi}. \quad (1.24)$$

Для нее можно получить явное выражение, если вычислить с помощью теоремы о вычетах интеграл в правой части равенства (1.24). Особенности подынтегрального выражения лежат в нижней полуплоскости комплексной частоты ω' . Поэтому интеграл равен нулю для $\tau < 0$, т. е. для $t < t'$. В этом выражается принцип причинности: причина — электрическое поле, не может быть раньше следствия — колебания координаты осциллятора. Вычисление интеграла (1.24) дает:

$$G(\tau) = \frac{\Theta(\tau) \exp(-\delta_0 \tau)}{\sqrt{\omega_0^2 - \delta_0^2}} \sin[\sqrt{\omega_0^2 - \delta_0^2} \tau], \quad (1.25)$$

где $\Theta(\tau)$ — тэта-функция Хэвисайда (единичная «ступенька»), которая равна нулю при $\tau < 0$ и единице при $\tau \geq 0$.

В отсутствии затухания функция Грина (1.25) приобретает совсем простой вид:

$$G(\tau) = \Theta(\tau) \frac{\sin(\omega_0 \tau)}{\omega_0}.$$

Подставляя правую часть равенства (1.25) в выражение (1.23), получаем

$$x(t) = \frac{e}{m\tilde{\omega}_0} \int_0^{\infty} \exp(-\delta_0 \tau) \sin(\tilde{\omega}_0 \tau) E(t - \tau) d\tau, \quad (1.26)$$

где $\tilde{\omega}_0 = \sqrt{\omega_0^2 - \delta_0^2}$ — «перенормированная» собственная частота, учитывающая затухание осциллятора. Физически понятно, что наличие затухания должно привести к уменьшению собственной частоты осциллятора. При записи правой части равенства (1.26) мы перешли от интегрирования по времени t' к интегрированию по разности времен $\tau = t - t'$.



Подчеркнем, что при выводе выражения (1.26) не использовался явный вид напряженности электрического поля, поэтому формула (1.26) носит универсальный характер: описывает отклик гармонического осциллятора на произвольные возмущения.

1.2. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ПОЛЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА

Вынужденные колебания

Рассмотрим воздействие на осциллятор импульса гауссовой формы, когда напряженность электрического поля в излучении изменяется по закону:

$$E(t) = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\Delta t^2}\right) \cos[\omega t + \Phi(t)], \quad (1.27)$$

где E_0 — амплитуда напряженности электрического поля; Δt — длительность импульса; ω — несущая частота; $\Phi(t)$ — фаза несущей по отношению к огибающей импульса, которая в данном случае равна:

$$E_{\text{env}}(t) = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\Delta t^2}\right).$$

Заметим, что постоянная фаза Φ в англоязычной литературе называется *carrier-envelope phase* (CE-фаза). Случай монохроматического поля отвечает бесконечной длительности импульса ($\Delta t \rightarrow \infty$) и $\Phi = \text{const}$.

Для определения координаты вынужденных колебаний можно воспользоваться равенством (1.26), в котором удобно ввести новую переменную $t' = t - \tau$. Тогда, применяя формулу для синуса разности, находим:

$$x(t) = \frac{e}{m\tilde{\omega}_0} \left\{ \sin(\tilde{\omega}_0 t) C(t) - \cos(\tilde{\omega}_0 t) S(t) \right\}, \quad (1.28)$$

где косинус и синус — образы напряженности электрического поля,

$$C(t) = e^{-\delta_0 t} \int_{-\infty}^t e^{\delta_0 t'} \cos(\tilde{\omega}_0 t') E(t') dt'; \quad (1.29)$$

$$S(t) = e^{-\delta_0 t} \int_{-\infty}^t e^{\delta_0 t'} \sin(\tilde{\omega}_0 t') E(t') dt'. \quad (1.30)$$



Поскольку по предположению $E(t \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$, то решения (1.28)—(1.30) описывают осциллятор, не возбужденный до начала действия импульса поля: $x(t \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$.

Если константа затухания больше обратной длительности импульса, то после окончания его действия $t > \Delta t$ амплитуда колебаний осциллятора обращается в ноль. Мы будем в дальнейшем интересоваться противоположным случаем, когда затухание мало

$$\delta_0 \ll \frac{1}{\Delta t}$$

и существует такой промежуток времени

$$\Delta t \ll t \ll \frac{1}{\delta_0},$$

на котором импульс уже закончился, а затухание осциллятора еще не проявилось. На таких временах в формулах (1.28)—(1.30) можно пренебречь параметром δ_0 , а интегрирование распространить до бесконечности. Тогда величины $C(\infty)$ и $S(\infty)$ выражается через Фурье-образ напряженности электрического поля согласно равенствам:

$$\begin{aligned} C(\infty) &= \operatorname{Re} \{ E(\omega' = \omega_0) \}; \\ S(\infty) &= \operatorname{Im} \{ E(\omega' = \omega_0) \}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

С учетом этих соотношений в интервале времени $\Delta t \ll t \ll 1/\delta_0$ формула (1.28) перепишется в виде:

$$x(t) = \frac{e}{m\omega_0} |E(\omega_0)| \sin(\omega_0 t - \arg[E(\omega_0)]), \quad (1.32)$$

где по определению $|E(\omega_0)|$ — модуль Фурье-образа напряженности электрического поля на собственной частоте колебаний гармонического осциллятора,

$$|E(\omega_0)| = \sqrt{\{\operatorname{Re}(E(\omega_0))\}^2 + \{\operatorname{Im}(E(\omega_0))\}^2};$$

$\arg[E(\omega_0)]$ — аргумент этого Фурье-образа,

$$\arg[E(\omega_0)] = \operatorname{arctg} \left\{ \frac{\operatorname{Im}[E(\omega_0)]}{\operatorname{Re}[E(\omega_0)]} \right\}.$$



Таким образом, формула (1.32) дает компактное представление колебаний гармонического осциллятора *после окончания действия возбуждающего импульса* электрического поля на временах, когда затуханием колебаний можно пренебречь. Такие колебания мы для краткости будем называть *асимптотическими*. Поскольку импульс поля уже закончился, то естественно, что осцилляции (1.32) происходят на собственной частоте ω_0 . Из выражения (1.32), в частности, следует, что импульс электрического поля определяет не только амплитуду, но и фазу асимптотических колебаний. Как это будет видно из дальнейшего, при определенных условиях эта фаза не совпадает с начальной фазой электромагнитного импульса, но может заметно отличаться от нее.

Возбуждение осциллятора импульсами с модулированной фазой

Рассмотрим два конкретных примера гауссового импульса (1.27), представляющих интерес с точки зрения приложений современной лазерной физики и химии (рис. 1.2).

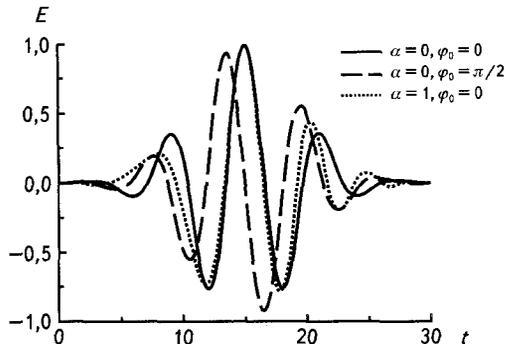


Рис. 1.2. Импульсы электрического поля с различной СЕ-фазой и чирпом

В первом случае полагаем, что фаза несущей по отношению к огибающей (СЕ-фаза) является постоянной: $\Phi(t) = \varphi_0 = \text{const}$, но от импульса к импульсу ее величину можно изменять требуемым образом. Управление фотостимулированными процессами за счет изменения СЕ-фазы называется *фазовым контролем*. Фазовый контроль может быть реализован на практике, поскольку в настоящее время развиты эффективные способы управления СЕ-фазой с весьма вы-



сокой точностью. При этом длительность импульсов может быть очень малой, порядка периода колебаний на несущей частоте:

$$\Delta t = n_p T = \frac{2\pi}{\omega} n_p, \quad (1.33)$$

где n_p — число порядка единицы. Импульсы, удовлетворяющие данному условию, называются *ультракороткими*. Если $n_p = 1$, импульс называется одноцикловым, в случае $n_p < 1$ говорят о субцикловых импульсах.

Одноцикловые импульсы с различной СЕ-фазой представлены на рис. 1.2 для $\varphi_0 = 0$ (косинус-импульс) и $\varphi_0 = \pi/2$ (синус-импульс). Видно, что изменение СЕ-фазы влияет на форму импульса.

Во втором интересующем нас случае имеет место равенство $\Phi(t) = \kappa t^2$. Такой импульс называется *чирпированным*, а параметр κ представляет собой так называемый *временной чирп*. В рассматриваемом здесь чирпированном импульсе несущая частота линейным образом зависит от времени $\omega_c = \omega + \kappa t$. Чирпированные импульсы находят широкое применение в лазерной технике, работающей в фемто- и аттосекундном временных диапазонах.

Одноцикловый импульс с временным чирпом $\kappa = \Delta t^{-2}$ показан на рис. 1.2.

Как следует из формулы (1.31), для определения асимптотических колебаний гармонического осциллятора после воздействия возбуждающего импульса необходимо знать Фурье-образ напряженности электрического поля в этом импульсе. В первом из рассматриваемых случаев ($\Phi(t) = \varphi_0 = \text{const}$) для Фурье-образа поля имеем:

$$E(\omega') = \quad (1.34)$$

$$= E_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Delta t \left\{ \exp \left[-i\varphi_0 - \frac{(\omega - \omega')^2 \Delta t^2}{4} \right] + \exp \left[i\varphi_0 - \frac{(\omega + \omega')^2 \Delta t^2}{4} \right] \right\}.$$

а во втором, когда $\Phi(t) = \kappa t^2$:

$$E_\omega(\omega') = \frac{\sqrt{\pi} E_0 \Delta t}{\sqrt[4]{1 + \alpha^2}} \exp \left\{ -\frac{\omega^2 + \omega'^2 + 2i\alpha\omega\omega'}{\Delta\omega^2} \right\} \times \quad (1.35)$$

$$\times \cos \left\{ \frac{1}{2} \arctg(\alpha) - \frac{\alpha(\omega^2 + \omega'^2) - 2i\omega\omega'}{\Delta\omega^2} \right\},$$



где $\alpha = \kappa \Delta t^2$ — безразмерный чирп; $\Delta \omega$ — ширина спектра чирпированного импульса,

$$\Delta \omega = \frac{2\sqrt{1 + \alpha^2}}{\Delta t}.$$

Равенства (1.34) и (1.35) получаются при подстановке выражения (1.27) в формулу для Фурье-образа (1.11), если затем воспользоваться табличными значениями соответствующих интегралов [4].

Подставляя Фурье-образ электрического поля (1.34) в формулу (1.32), для координаты гармонического осциллятора после окончания действия короткого ($\Delta t \ll \delta_0^{-1}$) импульса электромагнитного излучения получаем следующее выражение:

$$x(t) = \sqrt{\pi} \frac{eE_0 \Delta t}{2m\omega_0} \times \sqrt{G(\omega_0, \omega, \Delta t)(1 + K(\omega_0, \omega, \Delta t) \cos(2\varphi_0))} \sin(\omega_0 t + \psi), \quad (1.36)$$

где $G(\omega_0, \omega, \Delta t)$ — спектральная линия возбуждения гармонического осциллятора,

$$G(\omega_0, \omega, \Delta t) = \exp\left[-\frac{\Delta t^2 (\omega_0 - \omega)^2}{2}\right] + \exp\left[-\frac{\Delta t^2 (\omega_0 + \omega)^2}{2}\right]; \quad (1.37)$$

$K(\omega_0, \omega, \Delta t)$ — коэффициент фазовой модуляции амплитуды колебаний,

$$K(\omega_0, \omega, \Delta t) = \operatorname{sech}(\omega_0 \omega \Delta t^2); \quad (1.38)$$

$\psi(\omega_0, \omega, \Delta t)$ — начальная фаза колебаний осциллятора после окончания действия импульса,

$$\psi(\omega_0, \omega, \Delta t) = \arctg \left\{ \operatorname{th} \left(\frac{\omega_0 \omega \Delta t^2}{2} \right) \operatorname{tg}(\varphi_0) \right\}. \quad (1.39)$$

Коэффициент фазовой модуляции (1.38) описывает изменение амплитуды колебаний осциллятора в зависимости от СЕ-фазы (φ_0) электромагнитного импульса. Для не слишком коротких импульсов ($n_p \geq 1$) выполняется условие $\omega_0 \omega \Delta t^2 \gg 1$, когда $K(\omega_0, \omega, \Delta t) \cong 0$, и фазовая модуляция отсутствует. Зависимости коэффициента фазо-



вой модуляции от безразмерной длительности импульса $\eta = \omega_0 \Delta t$ для различных отношений несущей частоты к собственной частоте осциллятора $r = \omega/\omega_0$ представлены на рис. 1.3.

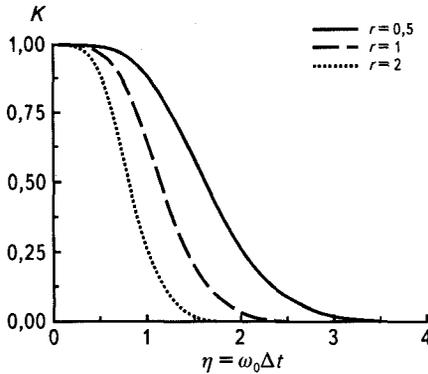


Рис. 1.3. Зависимость коэффициента модуляции колебаний гармонического осциллятора от безразмерного параметра $\eta = \omega_0 \Delta t$ для различных значений отношения $r = \omega/\omega_0$ при возбуждении импульсом с управляемой СЕ-фазой

Из рис. 1.3 следует, что коэффициент фазовой модуляции имеет заметную величину только для субцикловых импульсов, начиная с полуциклового, когда $\eta < 3$, причем величина $K(\omega_0, \omega, \Delta t)$ растет с уменьшением несущей частоты.

График спектральной линии возбуждения гармонического осциллятора, рассчитанный по формуле (1.37), представлен на рис. 1.4 для различных длительностей электромагнитного импульса. Из приведенных зависимостей вытекает, что с уменьшением длительности импульса линия возбуждения уширяется, становясь асимметричной, и в пределе бесконечно коротких импульсов трансформируется в монотонно убывающую кривую. Для длинных импульсов спектральная линия возбуждения имеет обычный вид гауссовой колоколообразной кривой с максимумом на собственной частоте осциллятора.

Отметим, что ширина спектральной линии возбуждения гармонического осциллятора в случае коротких мультицикловых импульсов с управляемой СЕ-фазой при выполнении условия $\delta_0 = 1/\Delta t$ определяется длительностью импульса и равна $\Delta\omega = 2/\Delta t$. Напомним, что в монохроматическом случае аналогичная величина определяется константой затухания осциллятора δ_0 .

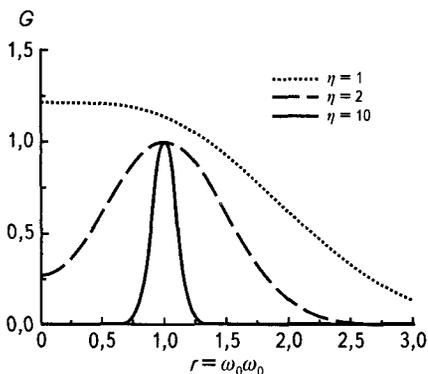


Рис. 1.4. Спектральная функция возбуждения гармонического осциллятора импульсом с управляемой СЕ-фазой для различных безразмерных длительностей импульса

При возбуждении гармонического осциллятора chirпированным импульсом формула для асимптотических колебаний имеет похожую на (1.36) структуру, только вместо СЕ-фазы в качестве параметра управления будет фигурировать безразмерный chirп $\alpha = \kappa \Delta t^2$. Соответствующие выражения имеют вид:

$$\bar{x}(t) = \sqrt{\pi} \frac{eE_0 \Delta t}{2m\omega_0^2 \sqrt{1 + \alpha^2}} \sqrt{\tilde{G}(1 + \tilde{K} \cos f(\alpha))} \sin(\omega_0 t + \tilde{\psi}); \quad (1.40)$$

$$\tilde{G} = \exp\left\{-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{\Delta\omega^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(\omega + \omega_0)^2}{\Delta\omega^2}\right\}; \quad (1.41)$$

$$\tilde{K} = \operatorname{sech}\left\{\frac{4\omega\omega_0}{\Delta\omega^2}\right\}; \quad (1.42)$$

$$f(\alpha) = \frac{2\alpha(\omega_0^2 + \omega^2)}{\Delta\omega^2} - \operatorname{arctg}(\alpha); \quad (1.43)$$

$$\tilde{\psi} = \operatorname{arctg} \left\{ \frac{\operatorname{tg}\left[\frac{\alpha(\omega_0^2 + \omega^2)}{\Delta\omega^2} - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \alpha\right] \operatorname{th}\left(\frac{2\omega\omega_0}{\Delta\omega^2}\right) - \operatorname{tg}\left(\frac{2\omega\omega_0}{\Delta\omega^2}\right)}{1 + \operatorname{tg}\left[\frac{\alpha(\omega_0^2 + \omega^2)}{\Delta\omega^2} - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \alpha\right] \operatorname{th}\left(\frac{2\omega\omega_0}{\Delta\omega^2}\right) \operatorname{tg}\left(\frac{2\omega\omega_0}{\Delta\omega^2}\right)} \right\}, \quad (1.44)$$



где $\Delta\omega$ — ширина спектра chirпированного импульса,

$$\Delta\omega = \frac{2\sqrt{1+\alpha^2}}{\Delta t}.$$

Как видно из формулы (1.40), ширина спектра импульса будет определять и ширину спектральной линии возбуждения гармонического осциллятора. Поскольку эта ширина возрастает с ростом параметра $\alpha = \kappa\Delta t^2$, то коэффициент \tilde{K} будет несколько больше своего СЕ-аналога (1.38) для тех же длительностей импульса. Кроме того, зависимость от chirпа, хотя и весьма слабая, содержится в предкоренном множителе формулы (1.40).

В пределе длинного возбуждающего импульса, когда $\Delta\omega \ll \omega$ и соответственно

$$\text{th}\left[2\omega \frac{\omega_0}{\Delta\omega^2}\right] \cong 1,$$

формула (1.44) упрощается к виду:

$$\tilde{\psi} = \frac{\alpha(\omega_0^2 - \omega^2)}{\Delta\omega^2} - \frac{1}{2} \text{arctg } \alpha, \quad (1.45)$$

так что тогда в резонансе имеем простое соотношение для сдвига фазы гармонического осциллятора

$$\tilde{\psi} = -\frac{1}{2} \text{arctg } \alpha.$$

Для малых chirпов ($|\alpha| < 1$), отсюда следует, что сдвиг фаз в результате воздействия на гармонический осциллятор chirпированного импульса пропорционален безразмерному chirпу

$$\tilde{\psi} \approx -\frac{\alpha}{2}.$$

Сдвиг фаз асимптотических колебаний как функция величины chirпа представлен на рис. 1.5.

Из рис. 1.5 следует, что отличие сдвига фаз (1.44) от простой зависимости $\tilde{\psi} \approx -\alpha/2$ существенно только для субцикловых импульсов и больших по модулю значений chirпа.

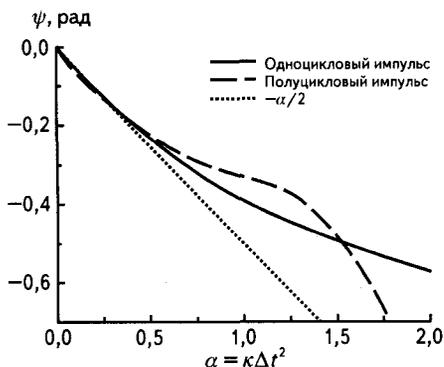


Рис. 1.5. Зависимость сдвига фаз асимптотических колебаний гармонического осциллятора от величины чирпа для различных длительностей возбуждающего импульса

Излучение гармонического осциллятора

На временном интервале $\Delta t \ll t \ll 1/\delta_0$, когда возбуждающий импульс уже закончился, а затухание осцилляций еще не проявилось, заряженный гармонический осциллятор будет излучать электромагнитные волны в соответствии с законами электродинамики.

Как известно, мгновенная мощность дипольного излучения определяется ускорением заряженной частицы:

$$Q = \frac{2e^2\ddot{x}^2}{3c^3}, \quad (1.46)$$

где \ddot{x} — ускорение заряда. Данная формула справедлива в дипольном приближении, когда выполняется неравенство (1.4), поэтому величина (1.46) называется мощностью дипольного излучения.

Для практических целей представляет интерес средняя за период колебания мощность излучения $\langle Q \rangle_T \equiv \langle Q \rangle$. В рассматриваемом случае гармонического осциллятора эту мощность можно выразить через полную энергию осциллятора E , если воспользоваться уравнением движения, согласно которому

$$\ddot{x} = -\omega_0^2 x.$$

Отсюда находим:

$$\ddot{x}^2 = \omega_0^4 x^2.$$

С другой стороны,

$$\omega_0^2 x^2 = \frac{2U}{m},$$

где U — потенциальная энергия гармонического осциллятора, так что

$$\ddot{x}^2 = \frac{2\omega_0^2 U}{m}; \quad Q = \frac{4e^2 \omega_0^2 U}{3mc^3}.$$

Усредняя последнее равенство по периоду и учитывая, что $2\langle U \rangle_T = E$, получаем искомое представление:

$$\langle Q \rangle = A_{sp} E, \quad (1.47)$$

где A_{sp} — коэффициент размерности обратного времени, который описывает вероятность спонтанного излучения, т. е. излучения, возникающего в процессе свободных колебаний заряженной частицы,

$$A_{sp} = \frac{2e^2 \omega_0^2}{3mc^3}. \quad (1.48)$$

Излучение электромагнитных волн приводит к потере энергии гармоническим осциллятором и к затуханию его колебаний. Таким образом, коэффициент (1.48), если нет других источников потерь, равен константе затухания δ_0 , фигурирующей в уравнении движения (1.10). В дальнейшем будет показано, что параметр A_{sp} с точностью до множителя совпадает с коэффициентом Эйнштейна для спонтанного излучения. В оптическом диапазоне частот, когда $\omega_0 \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ с}^{-1}$, из равенства (1.48) следует численное значение для коэффициента A_{sp} , равное 10^8 с^{-1} . Эта величина представляет собой характерную вероятность в единицу времени спонтанного излучения при переходе атомного электрона с одной орбиты на другую.

Отношение коэффициента спонтанного излучения (1.48) к собственной частоте может быть представлено в виде:

$$\frac{A_{sp}}{\omega_0} \approx \frac{r_e}{\lambda_0},$$

где r_e — классический радиус электрона,

$$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} \approx 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}; \quad (1.49)$$

λ_0 — длина волны на собственной частоте осциллятора,

$$\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0}.$$

Таким образом, в случае равенства $A_{sp} = \delta_0$ условие слабого затухания колебаний гармонического осциллятора

$$\frac{\delta_0}{\omega_0} \approx \frac{r_e}{\lambda_0} \ll 1$$

справедливо вплоть до очень коротких длин волн, соответствующих гамма-диапазону энергий световых квантов.

Полная энергия осциллятора связана с амплитудой его свободных колебаний x_{amp} согласно равенству:

$$E = \frac{m\omega_0^2 x_{amp}^2}{2},$$

которое получается после усреднения по периоду квадрата координаты. Принимая во внимание это соотношение, находим для средней за период мощности излучения:

$$\langle Q \rangle = \frac{2e^2 \omega_0^4}{3c^3} x_{amp}^2. \quad (1.50)$$

Определяя амплитуду асимптотических колебаний x_{amp} из равенства (1.36), с помощью (1.50) получаем среднюю мощность излучения гармонического осциллятора после его возбуждения импульсом гауссовой формы с управляемой СЕ-фазой:

$$\langle Q \rangle = \frac{\pi}{6} \frac{e^4}{mc^3} (\omega_0 \Delta t)^2 E_0^2 G [1 + K \cos(2\varphi_0)], \quad (1.51)$$

где спектральная линия возбуждения осциллятора G и коэффициент фазовой модуляции K определены формулами (1.37) и (1.38).

Выражение (1.51) говорит о том, что, изменяя СЕ-фазу, можно управлять мощностью излучения заряженного осциллятора после окончания действия импульса, если только коэффициент K имеет заметную величину. В рассматриваемом случае это возможно только для субцикловых возбуждающих импульсов в соответствии с формулой (1.38) и графиками на рис. 1.3.



При возбуждении гармонического осциллятора chirпированным импульсом для мощности его излучения вместо (1.51) имеет место похожая формула

$$\langle \bar{Q} \rangle = \frac{\pi}{6} \frac{e^4}{mc^3} \frac{(\omega_0 \Delta t)^2}{\sqrt{1 + \alpha^2}} E_0^2 \bar{G}(\alpha) \{1 + \bar{K}(\alpha) \cos[f(\alpha)]\}, \quad (1.52)$$

где $\alpha = \kappa \Delta t^2$ — безразмерный chirп частоты; функции \bar{G} , \bar{K} и f определены равенствами (1.41)—(1.43). В данном случае фазовый параметр (chirп) входит (через ширину спектра импульса $\Delta\omega = 2\sqrt{1 + \alpha^2}/\Delta t$) в определение спектральной линии возбуждения осциллятора (1.41), коэффициент $\bar{K}(\alpha)$ и в общий множитель в выражении для мощности (1.52). Поэтому управление мощностью излучения осциллятора, возбужденного chirпированным импульсом, возможно и при мультицикловых импульсах, хотя и с небольшой эффективностью.

1.3. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ПОЛЕ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В тепловом излучении амплитуды, фазы и поляризации напряженностей электромагнитного поля с течением времени изменяются случайным образом. В то же время средние характеристики излучения, такие как пространственная плотность энергии u , постоянны во времени и не изменяются в пространстве. Можно сказать, что тепловое излучение относится к классу случайных стационарных и однородных в пространстве полей. Спектральная плотность энергии стационарного случайного поля в единице объема равна:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega\tau) \langle \mathbf{E}(t) \mathbf{E}(t + \tau) \rangle d\tau. \quad (1.53)$$

Здесь $\langle \mathbf{E}(t) \mathbf{E}(t + \tau) \rangle$ — автокоррелятор напряженности электрического поля, который по предположению о стационарности не зависит от момента времени t , угловые скобки обозначают усреднение по состоянию поля. Формула (1.53) может быть получена из выражения пространственной плотности энергии поля

$$u = \frac{\langle \mathbf{E}^2 \rangle}{4\pi}$$



в электромагнитной волне в вакууме с помощью разложения в интеграл Фурье и сравнения с равенством (см. приложение 1)

$$u = \int_0^{\infty} \rho(\omega) d\omega.$$

Выведем полезное соотношение, связывающее среднее от произведения Фурье-образов напряженностей электрического поля со спектральной плотностью энергии излучения. Это соотношение имеет вид [1]

$$\langle E(\omega) E(-\omega') \rangle = (2\pi)^3 \rho(\omega) \delta(\omega - \omega'). \quad (1.54)$$

Для доказательства подставим в левую часть данного равенства выражения для Фурье-образов напряженностей (1.11):

$$\begin{aligned} \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) E(t) dt \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega' t') E(t') dt' \right\rangle &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t - i\omega' t') \langle E(t) E(t') \rangle dt dt'. \end{aligned}$$

Введем новую переменную интегрирования $\tau = t - t'$ и учтем, что из-за условия стационарности

$$\langle E(t) E(t') \rangle = \langle E(t' + \tau) E(t') \rangle = \langle E(\tau) E(0) \rangle.$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t - i\omega' t') \langle E(t) E(t') \rangle dt dt' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega(t' + \tau) - i\omega' t') \langle E(\tau) E(0) \rangle d\tau dt' = \\ &= 2\pi \delta(\omega - \omega') \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega\tau) \langle E(\tau) E(0) \rangle d\tau = (2\pi)^3 \delta(\omega - \omega') \rho(\omega). \end{aligned} \quad (1.55)$$

При переходе к последнему равенству было использовано определение спектральной плотности энергии электромагнитного поля (1.53) и интегральное представление дельта-функции:

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\alpha t) dt. \quad (1.56)$$

Таким образом, равенство (1.54) доказано.

С помощью соотношения (1.54) можно получить важную связь между мощностью, поглощаемой гармоническим осциллятором при воздействии на него электромагнитного излучения, и спектральной плотностью энергии излучения (1.53). Для этого воспользуемся выражением для мгновенной мощности взаимодействия между электрическим полем $E(t)$ и зарядом e , движущимся вдоль оси x , имея в виду одномерный осциллятор:

$$P(t) = e\dot{x}(t)E_x(t). \quad (1.57)$$

В случае гармонического осциллятора координата вынужденных колебаний $x(t)$ дается формулой (1.14), с помощью которой легко найти скорость $\dot{x}(t)$:

$$\dot{x}(t) = -i \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' E_x(\omega') \exp(-i\omega' t) d\omega'}{\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_0}. \quad (1.58)$$

Подставляя выражение (1.58) и представление поля $E_x(t)$ через Фурье-образ (1.13) в равенство (1.57), производя усреднение по состояниям поля с помощью формулы (1.54) и переходя к интегрированию по положительным частотам, находим для средней мощности:

$$\begin{aligned} P \equiv \langle P \rangle &= \frac{2\pi e^2}{3m} \int_0^{\infty} \frac{4\omega'^2 \delta_0 \rho(\omega') d\omega'}{(\omega_0^2 - \omega'^2)^2 + (2\omega'\delta_0)^2} \approx \\ &\approx \frac{2\pi^2 e^2}{3m} \int_0^{\infty} G^{(h)}(\omega') \rho(\omega') d\omega', \end{aligned} \quad (1.59)$$

где $G^{(h)}(\omega')$ — однородная форма линии,

$$G^{(h)}(\omega') = \frac{\delta_0/\pi}{(\omega_0 - \omega')^2 + (\delta_0)^2}. \quad (1.60)$$

При выводе (1.59) было также учтено, что в случайном электромагнитном поле все поляризации равновероятны, так что

$$\langle E_x^2 \rangle = \frac{\langle E^2 \rangle}{3}.$$



Приближенное равенство в формуле (1.59) отвечает предположению о слабом затухании гармонического осциллятора $\delta_0 \ll \omega_0$. В пределе нулевого затухания $\delta_0 \rightarrow 0$ форма линии (1.60) аппроксимируется дельта-функцией:

$$G^{(h)}(\omega') \rightarrow \delta(\omega' - \omega_0). \quad (1.61)$$

Выражение (1.59) описывает энергию, которая поглощается гармоническим осциллятором в единицу времени, при воздействии на него излучения со спектральной плотностью $\rho(\omega')$. В случае электромагнитного поля с широким спектром, намного превосходящим ширину линии гармонического осциллятора $\Delta\omega \gg \delta_0$, в правой части равенства (1.59) можно произвести замену (1.61). В результате получаем

$$P = \frac{2\pi^2 e^2}{3m} \rho(\omega_0). \quad (1.62)$$

Соотношение (1.62) описывает, в частности, взаимодействие теплового излучения с гармоническим осциллятором, когда выполняется условие $\Delta\omega \gg \delta_0$. Видно, что поглощаемая мощность определяется спектральной плотностью энергии излучения на собственной частоте осциллятора.

В состоянии динамического равновесия между тепловым излучением и осциллятором энергия (1.62), поглощаемая в единицу времени осциллятором, должна компенсироваться энергией, которая в единицу времени расходуется на излучения (1.47):

$$P = A_{sp} E. \quad (1.63)$$

Используя выражения (1.48) и (1.62), получаем отсюда связь между спектральной плотностью энергии теплового излучения $\rho_T(\omega)$ и энергией осциллятора E , находящегося в состоянии термодинамического равновесия с этим излучением:

$$\rho_T(\omega_0) = \frac{\omega_0^2}{\pi^2 c^3} E. \quad (1.64)$$

Равенство (1.64) было получено М. Планком в конце XIX в. Оно использовалось при выводе формулы для $\rho_T(\omega)$, который ознаменовал собой начало новой квантовой физики.



1.4. ОСЦИЛЛЯТОР МОРЗЕ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Определение и основные характеристики

Модель гармонического осциллятора описывает реальные физические системы в пределе малого отклонения от положения равновесия. С ростом этого отклонения начинает все сильнее сказываться ангармонизм. Математическое проявление ангармонизма заключается в том, что потенциальная энергия уже не описывается квадратичной зависимостью от координаты (1.1). Физически ангармонизм обнаруживается, прежде всего, в нелинейных процессах, которые отсутствуют для гармонических систем.

Важной моделью ангармонического осциллятора является модель Морзе, в которой потенциальная энергия дается выражением:

$$U^{(\text{Morse})}(x) = D \{ \exp(-2kx) - 2 \exp(-kx) \}, \quad (1.65)$$

где D — энергия связи; k — параметр потенциала; x — смещение координаты осциллятора из положения равновесия. Модель Морзе хорошо описывает колебания атомов в двухатомных молекулах, в этом случае $x = r - r_e$, где r , r_e — текущее и равновесное расстояния между ядрами [не путать с классическим радиусом электрона (1.49)].

В пределе малых отклонений от положения равновесия $x < 1/k$ потенциал Морзе переходит в параболическую зависимость потенциальной энергии от смещения координаты, характерную для гармонического осциллятора:

$$U^{(\text{Morse})}(x) \approx D \{ k^2 x^2 - 1 \}.$$

Сравнивая эту аппроксимацию с потенциальной энергией гармонического осциллятора

$$U^{(\text{harm})}(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} - D,$$

находим следующее выражение для параметра потенциала Морзе через характеристики гармонического осциллятора

$$k = \omega_0 \sqrt{\frac{m}{2D}}.$$



На рис. 1.6 приведены график потенциала Морзе, построенный для параметров молекулы монооксида углерода (CO), и соответствующая параболическая аппроксимация.

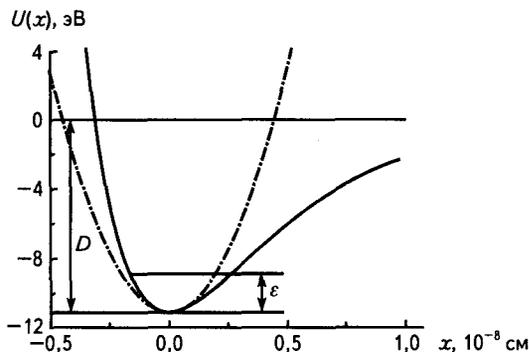


Рис. 1.6. Потенциал Морзе, построенный для параметров молекулы CO (сплошная кривая), и соответствующая гармоническая аппроксимация (штрихпунктир)

Для молекулы CO имеем: $D = 11,1$ эВ, $\hbar\omega_0 = 0,27$ эВ, $m = 1,2 \cdot 10^4 m_e$ (m_e — масса электрона), $k = 1,19 a_B^{-1}$ ($a_B \cong 0,53 \cdot 10^{-8}$ см — радиус Бора), $r_e \cong 1,128 \cdot 10^{-8}$ см.

Качественным отличием потенциала Морзе от гармонического потенциала является его асимметричный вид с горизонтальной асимптотой $U = 0$ в области $x \gg 1/k$. Эта асимптота делит энергетический спектр осциллятора на две части: положительную ($U > 0$) и отрицательную ($U < 0$). Отрицательная часть спектра соответствует финитному движению, когда координата осциллятора изменяется в конечных пределах. Напротив, положительная часть спектра отвечает инфинитному движению, при котором координата осциллятора неограниченно возрастает (осцилляции превращаются в разлет). В случае, когда потенциал Морзе описывает двухатомную молекулу, в области отрицательных энергий атомы, составляющие молекулу, совершают колебания в ограниченной области пространства. Положительная часть спектра двухатомной молекулы соответствует диссоциированному состоянию, при котором межатомное расстояние стремится к бесконечности. В рамках такой картины энергия связи D имеет смысл энергии диссоциации молекулы. Потенциал Морзе,



таким образом, описывает не только колебательное движение, но и разлет атомов.

В рамках квантово-механического формализма область отрицательных энергий отвечает дискретному спектру, когда энергия системы изменяется скачком (квантовым образом). Положительные энергии соответствуют непрерывному спектру, в котором энергия системы может изменяться на сколь угодно малую величину. Гармонический осциллятор в квантовой картине имеет только дискретный спектр, уровни энергии в котором расположены эквидистантно (на равном расстоянии между ближайшими уровнями). Осциллятор Морзе имеет как дискретный, так и непрерывный спектр энергии, причем уровни энергии в дискретном спектре расположены неэквидистантно: расстояние между ними уменьшается по мере приближения к границе непрерывного спектра. На классическом языке неэквидистантность уровней отвечает ангармонизму колебаний осциллятора. Ангармонизм колебаний характеризуется безразмерным параметром x_e , который в случае молекулы CO равен 0,00612. Параметр ангармонизма служит мерой отступления дискретного спектра реального осциллятора от эквидистантного приближения. В модели Морзе параметр ангармонизма однозначно связан с другими характеристиками потенциала согласно формуле

$$x_e = \frac{\hbar\omega_0}{4D}.$$

Отсюда для молекулы CO получаем теоретическое значение для параметра ангармонизма $x_e = 0,00608$. Сравнивая это значение с вышеприведенным экспериментальным, приходим к выводу, что в данном случае модель Морзе дает относительную погрешность всего 0,65 %. Таким образом, потенциал Морзе действительно является хорошим приближением к реальному потенциалу в случае двухатомных молекул.

Свободные колебания осциллятора Морзе

Неэквидистантность дискретного энергетического спектра в рамках классической картины соответствует тому факту, что период колебаний осциллятора Морзе зависит от его энергии в отличие от постоянного периода колебаний гармонического осциллятора $T = 2\pi/\omega_0$. Для определения этой зависимости и других особенностей движе-



ния рассмотрим свободные колебания осциллятора Морзе сначала в отрицательной части спектра, когда $\varepsilon < D$ (ε — энергия осциллятора, измеренная от дна потенциальной ямы) (см. рис. 1.6). Удобно ввести безразмерное смещение координаты от положения равновесия $\rho = kx$ и безразмерное время $\tau = \omega_0 t$, тогда уравнение движения осциллятора Морзе можно записать в виде

$$\ddot{\rho}_{\tau^2} = \exp(-2\rho) - \exp(-\rho). \quad (1.66)$$

Отметим, что обезразмеренное уравнение (1.66) не содержит энергии связи D и параметра потенциала k , т. е. оно является универсальным для заданного вида потенциальной энергии.

Для определения зависимости $\rho(\tau)$ проще не решать уравнение движения (1.66) «в лоб», а воспользоваться законом сохранения энергии, который в безразмерных переменных может быть записан следующим образом:

$$\dot{\rho}_{\tau}^2 + e^{-2\rho} - 2e^{-\rho} = \tilde{\varepsilon} - 1, \quad (1.67)$$

где $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/D$ — безразмерная энергия. Для финитного движения (колебательный режим) $1 > \tilde{\varepsilon} > 0$. Из равенства (1.67) легко получить:

$$\tau - \tau_0 = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{dy}{\sqrt{\tilde{\varepsilon} - 1 + 2e^{-y} - e^{-2y}}}, \quad (1.68)$$

где τ_0 — постоянная интегрирования. Формула (1.68) дает зависимость $\rho(\tau)$ в неявном виде. Для получения явного вида функции $\rho(\tau)$ нужно вычислить интеграл в правой части (1.68) и выразить ρ через безразмерное время τ . В результате находим

$$\rho(\tau) = \ln \left\{ \frac{1 - \sqrt{\tilde{\varepsilon}} \sin \left[\sqrt{1 - \tilde{\varepsilon}} \tau + \chi(\tilde{\varepsilon}, \rho_0) \right]}{1 - \tilde{\varepsilon}} \right\}, \quad (1.69)$$

где $\chi(\tilde{\varepsilon}, \rho_0)$ — начальная фаза колебаний, определяемая начальным условием $\rho_0 = \rho(\tau = 0)$. Полученное выражение «работает» в интервале безразмерной энергии $1 > \tilde{\varepsilon} > 0$, т. е. в отрицательной части спектра.

Гармоническое приближение справедливо для малых энергий возбуждения осциллятора Морзе, т. е. для $\tilde{\varepsilon} \ll 1$ ($\varepsilon \ll D$). Тогда равенство (1.69) переходит в хорошо известное выражение для свобод-



ных колебаний гармонического осциллятора (в безразмерных переменных):

$$\rho(\tau, \tilde{\varepsilon} \ll 1) \equiv -\sqrt{\tilde{\varepsilon}} \sin(\tau + \chi). \quad (1.70)$$

Как и следовало ожидать, амплитуда колебаний пропорциональна корню квадратному из энергии, а сами колебания происходят по гармоническому закону.

Из формулы (1.69) вытекает, что период колебаний осциллятора Морзе зависит от энергии и равен:

$$T^{(\text{Morse})}(\varepsilon) = \frac{2\pi}{\omega_0 \sqrt{1 - \varepsilon/D}}. \quad (1.71)$$

Отсюда видно, что с возрастанием энергии период растет и при $T^{(\text{Morse})} \rightarrow \infty$. Таким образом, при достижении границы отрицательной части спектра ($\tilde{\varepsilon} = 1$) периодическое движение осциллятора Морзе трансформируется в аperiodическое. Закон движения для граничной энергии $\varepsilon = D$ в безразмерных переменных имеет вид:

$$\rho(\tau) = \ln \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + \left(\tau - \sqrt{2 \exp(\rho_0) - 1} \right)^2 \right] \right\}, \quad (1.72)$$

где $\rho_0 = \rho(0)$ — значение безразмерной координаты в начальный момент времени, причем должно быть $\rho_0 \geq -\ln 2$ для положительности подкоренного выражения в правой части равенства (1.72). В пределе больших времен $\tau \rightarrow \infty$ безразмерная координата осциллятора Морзе на границе спектра возрастает логарифмически: $\rho \propto \ln \tau$. При этом, очевидно, безразмерная скорость

$$\dot{\rho}_\tau \rightarrow \frac{1}{\tau},$$

т. е. уменьшается до нуля на бесконечности.

Для энергий положительной части спектра $\tilde{\varepsilon} > 1$ вычисление интеграла (1.68) приводит к следующему закону движения

$$\rho(\tau) = \ln \left\{ \frac{\tilde{v}^2 + [A(\tilde{v}, \rho_0) \exp(-\tilde{v}\tau) - 1]^2}{2\tilde{v}^2 A(\tilde{v}, \rho_0) \exp(-\tilde{v}\tau)} \right\}, \quad (1.73)$$

где $A(\tilde{v}, \rho_0)$ — постоянная, определяемая начальными условиями,

$$A(\tilde{v}, \rho_0) = \tilde{v}^2 \exp(\rho_0) + 1 + \tilde{v} \exp(\rho_0) \sqrt{\tilde{v}^2 + 2 \exp(-\rho_0) - \exp(-2\rho_0)}; \quad (1.74)$$

$\tilde{v} = \sqrt{\tilde{\epsilon} - 1}$ — безразмерная скорость. Из формулы (1.73) следует, что для больших времен $\tau \gg \tilde{v}^{-1}$ координата осциллятора $\rho \propto \tilde{v}\tau$, т. е. при положительной полной энергии осциллятора Морзе ($\tilde{\epsilon} > 1$) происходит разлет по линейному закону.

Временные зависимости свободного движения осциллятора Морзе в трех вышерассмотренных режимах представлены на рис. 1.7 для нулевой начальной координаты ($\rho_0 = 0$).

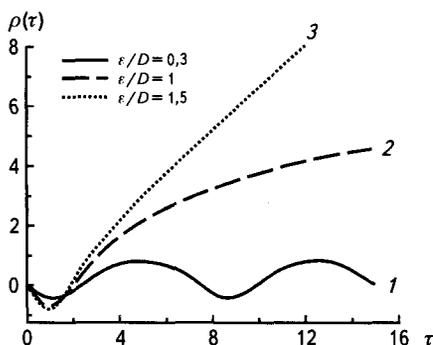


Рис. 1.7. Три режима движения свободного осциллятора Морзе:

1 — колебательный режим $\tilde{\epsilon} = 0,3$; 2 — разлет в режиме нулевой полной энергии; 3 — разлет в режиме положительной энергии $\tilde{\epsilon} = 1,5$

Видно, что с ростом полной энергии осцилляции (кривая 1) сменяются разлетом по логарифмическому закону (кривая 2) для нулевой полной энергии, далее следует линейный разлет (во временном интервале $\tau \gg 1$) для положительной энергии (кривая 3). Колебания осциллятора Морзе в отличие от гармонического осциллятора носят асимметричный характер, что связано с асимметрией потенциала Морзе (см. рис. 1.6).

Описанные три режима одномерного движения осциллятора Морзе имеют аналогию в двухмерном случае. Движение в кулоновском поле притяжения или гравитационном поле может происходить по эллипсу (отрицательная энергия), параболе (нулевая энергия) или гиперболе (положительная энергия).



Осциллятор Морзе в поле электромагнитного излучения

Пусть на заряженный осциллятор Морзе действует импульс электрического поля гауссовой формы (1.27). Уравнение движения осциллятора в безразмерных переменных можно представить в виде

$$\ddot{\rho}_{\tau^2} = \exp(-2\rho) - \exp(-\rho) + \gamma \tilde{E}(\tau), \quad (1.75)$$

где γ — безразмерный параметр, характеризующий силу связи между электрическим полем и осциллятором Морзе,

$$\gamma = \frac{kqE_0}{m\omega_0^2}$$

(q — эффективный заряд осциллятора); $\tilde{E}(\tau, \varphi_0)$ — безразмерная напряженность электрического поля как функция безразмерного времени $\tau = \omega_0 t$,

$$\tilde{E}(\tau, \varphi_0) = \frac{E(\tau/\omega_0)}{E_0}.$$

Эффективный заряд осциллятора в случае двухатомной молекулы может быть определен по формуле

$$q = \frac{\partial \mu(r)}{\partial r},$$

где $\mu(r)$ — зависимость дипольного момента двухатомной молекулы от расстояния между ядрами (не путать с постоянным дипольным моментом молекулы, если таковой имеется). Эффективный заряд осциллятора, описывающего молекулу CO, вычисленный с помощью квантово-химической программы «Gaussian» равен: $q = 0,78e$ (здесь e — элементарный заряд). В случае взаимодействия электрического поля и молекулы монооксида углерода с помощью вышеприведенных численных значений для характеристик потенциала Морзе можно получить следующее выражение для параметра силы связи, как функции амплитуды напряженности электрического поля и атомной напряженности:

$$\gamma = 0,65 \frac{E_0}{E_a},$$



где $E_a \cong 5 \cdot 10^9$ В/см. Таким образом, параметр γ близок к единице для весьма высоких значений напряженности электрического поля (порядка атомной напряженности).

Численный анализ показывает, что решение уравнения (1.75) отличается от своего гармонического аналога для $\gamma > \gamma^* = 0,05$. Критическое значение γ^* слабо зависит от несущей частоты, начальной фазы и длительности импульса в режиме сверхкоротких импульсов $\eta < 10$.

Таким образом, в области слабой силы связи $\gamma < 0,05$ фазовая зависимость возбуждения ангармонического осциллятора в модели Морзе описывается теми же формулами, что и для случая гармонического осциллятора. Используя приведенное неравенство для длительности импульса $\Delta t < 30$ фс, получаем следующее ограничение на плотность потока энергии в возбуждающем импульсе $dE/dS < 10$ Дж/см², при выполнении которого «работает» гармоническое приближение для молекулы СО.

Первоначально покоившийся осциллятор Морзе под действием электрического поля будет набирать энергию в соответствии с формулой

$$\varepsilon = 2\gamma D \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\rho}(\tau) \tilde{E}(\tau) d\tau, \quad (1.76)$$

которая следует из стандартного выражения для мощности (1.57). Здесь, как и ранее, энергия отсчитывается от дна потенциальной ямы (см. рис. 1.6). Расчетные зависимости энергии осциллятора Морзе от параметра γ после воздействия одноциклового импульса электрического поля гауссовой формы (1.27) с постоянной SE-фазой представлены на рис. 1.8 для различных значений SE-фазы.

Видно, что зависимость энергии осциллятора Морзе от силы поля для сверхкороткого импульса существенно зависит от начальной (SE) фазы. При изменении фазы от $-\pi/2$ до $\pi/2$ данная зависимость меняет свой характер с монотонно возрастающей до кривой с минимумом при $\gamma = 0,52$. Отсюда, в частности, следует, что в данном случае диссоциация двухатомной молекулы (т. е. достижение значения $\tilde{\varepsilon} = 1$), легче осуществляется для SE-фазы $\varphi_0 = -\pi/2$. Если же $\varphi_0 = \pi/2$, диссоциация импульсом $\eta = 4$ возможна только для $\gamma > 1$.

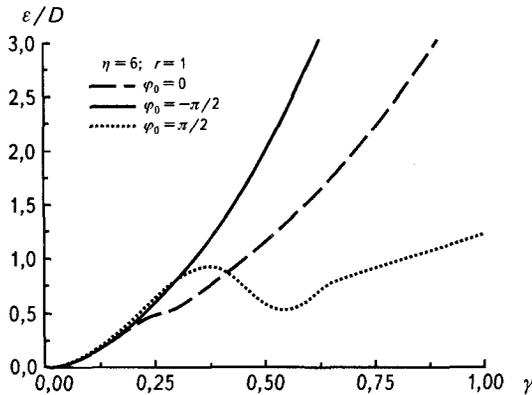


Рис. 1.8. Нормированная энергия осциллятора Морзе после воздействия одноклового электрического импульса ($\eta = \omega_0 \Delta t$) как функция силы связи для различных значений СЕ-фазы

Излучение осциллятора Морзе

В соответствии с общими законами электродинамики возбужденный заряженный осциллятор Морзе будет излучать электромагнитные волны. Так же как и в случае гармонического осциллятора, мощность излучения осциллятора Морзе на временах $t > \Delta t$ может быть выражена через энергию осциллятора ε (см. приложение 2):

$$Q^{(\text{Morse})} = \frac{2q^2 \omega_0^2}{3mc^3} \varepsilon \sqrt{1 - \frac{\varepsilon}{D}}. \quad (1.77)$$

Сравнивая выражение (1.77) с формулами (1.47) и (1.48), описывающими гармонический осциллятор, приходим к выводу, что мощность дипольного излучения осциллятора Морзе как функция энергии ε отличается множителем $\sqrt{1 - \varepsilon/D}$ от своего гармонического аналога. Таким образом, при возбуждении заряженного осциллятора Морзе в интервал значений энергии вблизи энергии диссоциации $\varepsilon \approx D$ мощность излучения стремится к нулю, что связано с уменьшением частоты колебаний при увеличении энергии осциллятора. Из равенства (1.77) следует, что максимальная мощность дипольного излучения осциллятора Морзе достигается при энергии $\varepsilon = 2D/3$. Линейный режим возбуждения излучения имеет место для



малых энергий $\varepsilon \ll D$. Заметное отклонение от линейности (более 10%) возникает при $\varepsilon > D/5$.

Результаты расчета мощности дипольного излучения осциллятора Морзе как функции СЕ-фазы после воздействия субциклового импульса электрического поля представлены на рис. 1.9 для различных значений параметра силы поля γ и $\omega = \omega_0$ ($r = 1$).

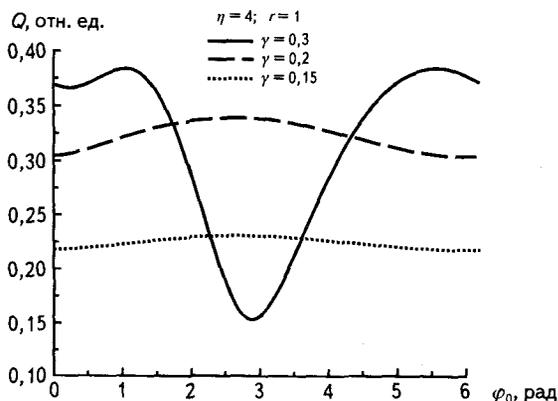


Рис. 1.9. Фазовая зависимость мощности дипольного излучения заряженного осциллятора Морзе после воздействия субциклового импульса электрического поля гауссовой формы (1.27) для различных параметров силы связи и $\omega = \omega_0$

Из рис. 1.9 следует, что чувствительность мощности излучения осциллятора Морзе к СЕ-фазе после возбуждения одноцикловым импульсом наблюдается только в нелинейном режиме $\gamma > 0,1$. В противном случае $\gamma < 0,1$, когда «работает» гармоническое приближение, фазовая зависимость исчезает. Действительно, в случае гармонического осциллятора справедливо выражение (1.38) для коэффициента фазовой модуляции мощности излучения, подставляя в которое численные значения параметров, находим $K(r = 1, \eta = 4) \approx 2 \cdot 10^{-7}$.

Таким образом, для одноциклового и более длительных возбуждающих импульсов с управляемой СЕ-фазой фазовая зависимость мощности излучения осциллятора Морзе проявляется только в нелинейном режиме возбуждения. Тогда характер фазовой модуляции отличается от гармонического закона (1.51) и сильно зависит от величины параметра связи между полем и осциллятором γ . Заметная

фазовая чувствительность возбуждения осциллятора Морзе в линейном режиме возникает только для субцикловых импульсов поля при $\eta = 2$ ($\Delta t < 3$), когда «работает» формула (1.38).

Осциллятор Морзе в поле chirпированного импульса

Как и в случае гармонического осциллятора, возбуждение осциллятора Морзе chirпированным импульсом обнаруживает более сильную зависимость от фазового параметра (от chirпа частоты). Колебания осциллятора Морзе, рассчитанные путем численного решения уравнения (1.75) для различной величины безразмерного chirпа ($\alpha = \kappa \Delta t^2$), приведены на рис. 1.10.

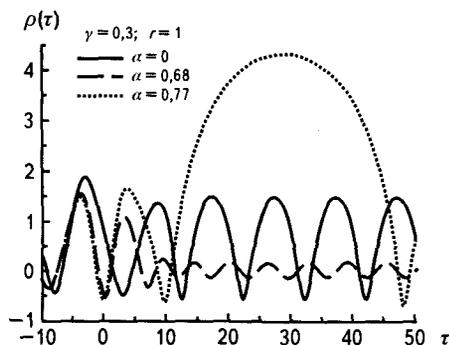


Рис. 1.10. Колебания осциллятора Морзе, возбужденного двухцикловыми импульсами ($\eta = 12$) с различной величиной chirпа частоты при константе взаимодействия $\gamma = 0,3$:

сплошная кривая — $\alpha = 0$; штриховая — $\alpha = 0,68$; пунктирная — $\alpha = 0,77$

Видно, что в данном случае амплитуда колебаний существенно меняется при переходе от одного значения параметра $\alpha = \kappa \Delta t^2$ к другому. Значению $\alpha = 0,68$, в частности, отвечает минимум амплитуды.

Из формулы (1.69) следует, что амплитуда колебаний осциллятора Морзе определяется энергией осциллятора в соответствии с выражением

$$\rho_{\text{amp}}(\tilde{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{1 + \sqrt{\tilde{\varepsilon}}}{1 - \sqrt{\tilde{\varepsilon}}} \right\}, \quad (1.78)$$

поэтому ясно, что чем выше энергия возбуждения, тем больше амплитуда колебаний.

Для объяснения зависимостей рис. 1.10 на рис. 1.11 представлена безразмерная энергия осциллятора Морзе как функция чирпа для одно- и двухциклового возбуждающих импульсов. Расчет $\bar{\epsilon}(\alpha)$ проведен по формуле (1.76) с помощью численного решения уравнения (1.75).

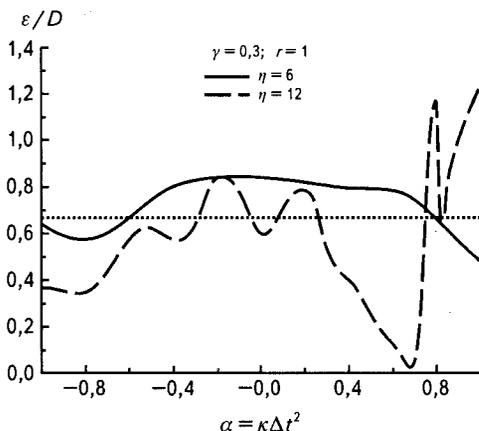


Рис. 1.11. Безразмерная энергия осциллятора Морзе как функция чирпа для одно- и двухциклового возбуждающих импульсов ($\gamma = 0,3, r = 1$). Прямой линией показано оптимальное значение энергии, при котором усредненная по периоду мощность излучения осциллятора после окончания действия электромагнитного импульса максимальна

Видно, что с ростом длительности импульса зависимость энергии возбуждения от величины чирпа становится более сильной, причем возрастает асимметрия функции $\bar{\epsilon}(\alpha)$ по отношению к изменению знака чирпа. Для двухциклового импульса при заданных значениях параметров энергия возбуждения имеет глубокий минимум для $\alpha = 0,68$, что отражено на соответствующей временной зависимости рис. 1.10 малой величиной амплитуды асимптотических колебаний. Напротив, для $\alpha = 0,77$, как следует из рис. 1.11, энергия возбуждения осциллятора Морзе имеет локальный максимум, так что колебания, отвечающие данному значению чирпа в соответствии с формулой (1.78), имеют большую амплитуду. На этом же рисунке пря-



мой линией показано значение энергии возбуждения $\bar{\epsilon}_{\text{opt}} = 2/3$, при котором мощность излучения осциллятора Морзе после окончания действия импульса максимальна.

Таким образом, использование потенциала Морзе позволяет в рамках классического подхода провести моделирование взаимодействия электромагнитного излучения с молекулярными системами с учетом их возбуждения и диссоциации.

1.5. ВОЗБУЖДЕНИЕ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ С ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЕЙ

Выше анализировалось взаимодействие *свободного* электромагнитного поля с классическим осциллятором. Представляет интерес также рассмотреть возбуждение осциллятора в результате столкновения с заряженными частицами, когда взаимодействие обусловлено кулоновским полем заряда частиц. Таким образом можно моделировать процессы столкновительного возбуждения атомов и молекул в дискретном спектре и ряд других неупругих столкновительных явлений.

Воспользуемся уравнением (1.10) для вынужденных колебаний гармонического осциллятора, только теперь под электрическим полем $E(t, \rho)$ будем понимать поле заряда, пролетающего мимо осциллятора по некоторой классической траектории с заданным прицельным параметром ρ (рис. 1.12).

Тогда для энергии, переданной от заряда осциллятору за все время взаимодействия, имеем:

$$E(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} e \dot{x} E_x(t, \rho) dt \cong \frac{e^2}{2m} \int_0^{\infty} G^{(h)}(\omega) |E_x(\omega, \rho)|^2 d\omega, \quad (1.79)$$

где $G^{(h)}(\omega)$ — однородная форма линии, которая определена выражением (1.60); $E_x(\omega, \rho)$ — Фурье-образ проекции напряженности электрического поля на ось осциллятора. Напомним, что Фурье-

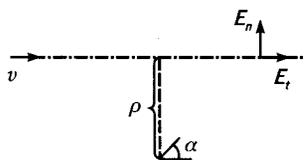


Рис. 1.12. Схема столкновения равномерно и прямолинейно движущейся частицы с осциллятором



образ произвольной функции $f(t)$ определяется интегралом (1.11). При переходе ко второму равенству в (1.79) было использовано предположение о малом затухании гармонического осциллятора $\delta_0 \ll \omega_0$, как и при выводе формулы (1.59).

Наиболее прост случай, когда заряженная частица, возбуждающая осциллятор, движется равномерно и прямолинейно со скоростью v , образующей угол α с осью осциллятора (см. рис. 1.12). Тогда для Фурье-образа напряженности электрического поля, создаваемого нерелятивистским зарядом e в месте расположения осциллятора, можно получить

$$E(\omega, \rho) = \frac{2e}{\rho v} \left\{ F\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_n - iF'\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_\tau \right\}, \quad (1.80)$$

где $\mathbf{e}_n, \mathbf{e}_\tau$ — нормальный и тангенциальный (по отношению к вектору скорости $\mathbf{v} = \text{const}$) единичные векторы, функция $F(v)$ определяется равенством

$$F(v) = \int_0^\infty \frac{\cos(vx)}{(1+x^2)^{3/2}} dx, \quad (1.81)$$

(штрих обозначает дифференцирование по аргументу). Безразмерная частота $v = \omega\rho/v$ равна *параметру Мессе*, который определяет вероятность неупругих процессов, т. е. процессов, сопровождающихся изменением внутреннего состояния мишени. В данном случае неупругим процессом является возбуждение осциллятора после взаимодействия с заряженной частицей. Если параметр Мессе мал, то вероятность неупругого процесса велика, в противоположном случае столкновение носит упругий характер: возбуждение отсутствует.

Спектр нормальной и тангенциальной составляющих, а также модуля напряженности электрического поля равномерно движущегося заряда представлен на рис. 1.13. Из этого рисунка видно, что на всех частотах доминирует вклад нормальной к направлению скорости заряда составляющей напряженности. Максимальная относительная величина этого вклада равна единице на нулевой частоте. Тангенциальная составляющая напряженности электрического поля достигает максимума, равного 0,467, в точке $v_{\max}^{(\tan g)} = 0,56$. Соответствующие значения для модуля напряженности равны: 1,02 и $v_{\max}^{(\text{tot})} = 0,16$.

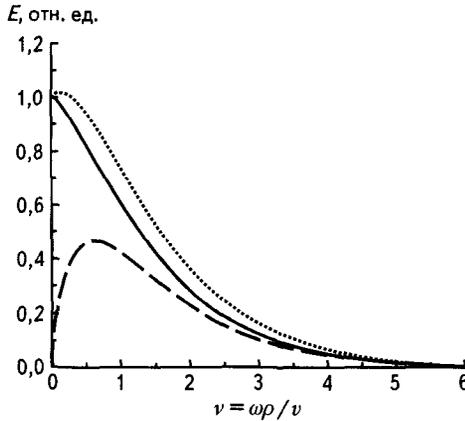


Рис. 1.13. Спектр электрического поля равномерно движущейся заряженной частицы как функция безразмерной частоты:

сплошная кривая — нормальной составляющей поля; *штриховая* — тангенциальной составляющей поля; *пунктирная* — модуля напряженности электрического поля

Ширина спектра напряженности электрического поля (1.80) порядка отношения

$$\frac{v}{\rho} \approx \frac{1}{\Delta t_{\text{eff}}},$$

где Δt_{eff} — эффективное время столкновения заряженной частицы с осциллятором. В практически важных случаях выполняется неравенство:

$$\Delta t_{\text{eff}} \ll \frac{1}{\delta_0} = \frac{T_2}{2},$$

т. е. эффективное время столкновения много меньше времени фазовой релаксации или времени затухания свободных колебаний осциллятора. Тогда форму линии во втором равенстве (1.79) можно заменить на дельта-функцию в соответствии с предельным переходом (1.61). В результате получается простая формула

$$E(\rho) = \frac{e^2}{2m} |E_x(\omega_0, \rho)|^2, \quad (1.82)$$

описывающая энергию возбуждения осциллятора в результате столкновения с заряженной частицей, движущейся по траектории с прицельным параметром ρ .



Если заряженная частица со скоростью порядка скорости электрона на первой боровской орбите атома водорода ($v_a \cong 2,18 \cdot 10^8$ см/с) пролетает мимо осциллятора с прицельным параметром, равным боровскому радиусу ($a_B \cong 0,53 \cdot 10^{-8}$ см), то эффективное время столкновения составляет 10^{-16} с. Характерное время фазовой релаксации в случае, когда затухание осциллятора обусловлено спонтанным излучением, равно 10^{-8} секунды. Таким образом, в рассмотренном типичном примере $T_2/\Delta t_{\text{eff}} \approx 10^8$ и предельный переход (1.61) выполняется, поэтому в дальнейшем будем пользоваться формулой (1.82).

Как отмечалось выше, для эффективного возбуждения физической системы необходимо, чтобы параметр Мессии $\nu = \omega\rho/v$ был меньше единицы. В условиях применимости формулы (1.82) это означает, что эффективное время столкновения должно быть много меньше периода колебаний гармонического осциллятора:

$$\Delta t_{\text{eff}} \ll T = \frac{2\pi}{\omega_0}.$$

В противном случае, как бы ни было велико электрическое поле, осциллятор не возбудится.

Для фигурирующего в равенстве (1.82) квадрата модуля Фурье-образа проекции электрического поля с учетом (1.80) имеем:

$$\begin{aligned} |E_x(\omega_0, \rho, \varphi)|^2 = & \\ = \left(\frac{2e}{\rho v}\right)^2 \left\{ F^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v}\right) \sin^2 \alpha \cos^2 \varphi + F'^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v}\right) \cos^2 \alpha \right\}, & \quad (1.83) \end{aligned}$$

где α — угол между вектором скорости \mathbf{v} и единичным вектором \mathbf{e}_x в направлении оси осциллятора. В формуле (1.83) введен *азимутальный угол* φ , равный углу между вектором \mathbf{e}_n и плоскостью $\mathbf{v} \times \mathbf{e}_x$. Он определяет плоскость траектории движения заряженной частицы. Таким образом, энергия возбуждения осциллятора в ходе столкновения с заряженной частицей оказывается функцией двух траекторных параметров: $E(\rho, \varphi)$.

По аналогии с излучательными процессами для характеристики эффективности возбуждения осциллятора однородным пучком заряженных частиц с одинаковой скоростью можно определить ве-



личину, называемую *эффективным возбуждением*, в соответствии с формулой:

$$\kappa_{\text{exc}} = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} E(\rho, \varphi) \rho d\rho d\varphi. \quad (1.84)$$

Эффективное возбуждение имеет размерность произведения энергии на площадь. Оно после умножения на плотность потока зарядов дает мощность возбуждения осциллятора. Подставляя выражения (1.82) и (1.83) в формулу (1.84) и заменяя нижний предел интегрирования по прицельному параметру, после интегрирования по азимутальному углу получаем

$$\kappa_{\text{exc}} = \frac{2\pi e^4}{mv^2} \int_a^{\infty} \left\{ F^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v} \right) \frac{\sin^2 \alpha}{2} + F'^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v} \right) \cos^2 \alpha \right\} \frac{d\rho}{\rho}. \quad (1.85)$$

Здесь введен нижний предел интегрирования $\rho_{\min} = a$, равный размеру осциллятора. Это «обрезание» интеграла (1.84) отражает тот факт, что при малых прицельных параметрах $\rho < a$ нарушается когерентность взаимодействия заряженной частицы с осциллятором, что приводит к уменьшению связи между электрическим полем и осциллятором. Иными словами, близкие пролеты заряженной частицы $\rho < \rho_{\min} = a$ дают пренебрежимо малый вклад в возбуждение осциллятора.

Как следует из графиков рис. 1.12 далекие пролеты $\rho > \rho_{\max} = v/\omega_0$ тоже не дают вклада в возбуждение, поскольку для них мала напряженность электрического поля заряда в месте расположения осциллятора.

Анализ выражения (1.84) показывает, что максимум эффективности возбуждения осциллятора достигается при $v_{\max} = a\omega_0 = v_0$, где v_0 — характерное для данного осциллятора значение скорости. Зависимость κ_{exc} от угла ориентации оси осциллятора α весьма слабая, особенно вблизи максимума скоростной зависимости эффективности возбуждения.

В случае равновероятной ориентации в пространстве оси осциллятора усреднение правой части равенства (1.84) по углу α дает:

$$\kappa_{\text{exc}} = \frac{2\pi e^4}{3mv^2} \int_a^{\infty} \left\{ F^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v} \right) + F'^2 \left(\frac{\rho\omega_0}{v} \right) \right\} \frac{d\rho}{\rho}. \quad (1.86)$$



При выводе (1.86) были использованы соотношения

$$\langle \cos^2 \alpha \rangle = \frac{1}{3}; \quad \langle \sin^2 \alpha \rangle = \frac{2}{3}.$$

Из полученного выражения следует, что эффективное возбуждение осциллятора определяется энергией заряженной частицы и квадратом модуля Фурье-образа напряженности ее электрического поля.

В теории неупругих столкновений часто используется *приближение Борна—Бете*, которому в рассматриваемом случае отвечает замена выражения в фигурных скобках (1.86) на $\theta(1 - \nu)$, где $\theta(\nu)$ — функция Хэвисайда, равная единице при положительном значении аргумента и нулю в противоположном случае. В приближении Борна—Бете формула (1.86) упрощается к виду:

$$\kappa_{\text{exc}}^{(\text{B-B})}(\tilde{\epsilon}) = \frac{\pi e^4}{3\epsilon_0} \frac{\ln(\tilde{\epsilon})}{\tilde{\epsilon}}, \quad (1.87)$$

где

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\epsilon_0};$$

ϵ_0 — характерная энергия осциллятора,

$$\epsilon_0 = \frac{mv_0^2}{2};$$

ϵ — энергия заряженной частицы,

$$\epsilon = \frac{mv^2}{2}.$$

Максимум эффективного возбуждения как функции безразмерной энергии $\tilde{\epsilon}$ достигается при $\tilde{\epsilon}_{\text{max}} = e \cong 2,87$. Заметим, что для случая возбуждения атомов электронами экспериментальные данные дают следующий диапазон энергий в максимуме $2,9 < \tilde{\epsilon}_{\text{max}} < 3,5$, что находится в разумном соответствии с предсказанием вышеизложенного подхода, основанного на модели гармонического осциллятора.

Эффективное возбуждение осциллятора (1.86) можно выразить через число фотонов электрического поля налетающего заряда, ко-



торое за все время столкновения проходит через единицу площади в единичный частотный интервал:

$$\frac{dN^{EP}(\omega, \rho)}{dS d\omega} = \frac{c}{(2\pi)^2} \frac{|E(\omega, \rho)|^2}{\hbar\omega}, \quad (1.88)$$

где \hbar — постоянная Планка. Тогда вместо формулы (1.86) имеем

$$\kappa_{\text{exc}} = \frac{2\pi^3 e^2}{3mc} \hbar\omega_0 \int_a^\infty \frac{dN^{EP}(\omega_0, \rho)}{dS d\omega} \rho d\rho. \quad (1.89)$$

Фотоны, составляющие кулоновское поле заряда, называются *эквивалентными*. Метод эквивалентных фотонов использовался Э. Ферми в 1924 г. (до создания квантовой механики) для расчета возбуждения атомов и молекул заряженными частицами.

Полученные в данной главе выражения будут применены в последующем изложении при анализе электромагнитных взаимодействий с участием атомов, молекул и наночастиц.

Приложение 1

Получим соотношение (1.53), устанавливающее связь между спектральной плотностью энергии случайного стационарного поля и автокорреляционной функцией напряженности электрического поля. По определению пространственная плотность энергии E однородного электромагнитного поля, занимающего объем V , равна:

$$u = \frac{E}{V} = \left\langle \frac{E^2 + H^2}{8\pi} \right\rangle = \frac{\langle E^2(t) \rangle}{4\pi}. \quad (\text{П1.1})$$

Угловые скобки обозначают усреднение по состоянию электромагнитного поля, т. е. по амплитудам, фазам и поляризациям его монохроматических компонент. В третьем равенстве (П1.1) учтено, что в электромагнитной волне в вакууме напряженности электрического и магнитного поля совпадают. Коррелятор электрической напряженности стационарного поля по определению равен:

$$KE_{ik}(\tau) = \langle E_i(t) E_k(t + \tau) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} KE_{ik}(\omega) \exp(-i\omega\tau) \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (\text{П1.2})$$

Фурье-образ коррелятора $KE_{ik}(\omega)$ называется *тензором спектральной плотности* поля.

С помощью выражения (П1.2) равенство (П1.1) можно переписать в виде

$$u = \frac{\langle E^2(t) \rangle}{4\pi} = \frac{KE_{ii}(\tau = 0)}{4\pi} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} KE_{ii}(\omega) d\omega. \quad (\text{П1.3})$$

Здесь по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. При переходе к интегрированию по положительным частотам было

учтено, что функция $KE_{ii}(\omega)$ — четная, что легко показать из ее определения и действительности напряженности электрического поля $E_i(t)$.

Сравним теперь равенство (П1.3) с определением спектральной плотности поля

$$u = \int_0^{\infty} \rho(\omega) d\omega, \quad (\text{П1.4})$$

из которого вытекает, что

$$\rho(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} KE_{ii}(\omega); \quad (\text{П1.5})$$

$$KE_{ii}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} KE_{ii}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau} \langle \mathbf{E}(t) \mathbf{E}(t + \tau) \rangle d\tau. \quad (\text{П1.6})$$

Из формул (П1.4) и (П1.5) следует равенство (1.53).

Приложение 2

Выведем формулу (1.77), описывающую мощность дипольного излучения заряженного осциллятора Морзе, усредненную по периоду колебаний, после окончания возбуждающего импульса электромагнитного поля ($t \gg \Delta t$), когда колебания можно считать свободными. Исходим из выражения для мгновенной мощности дипольного излучения одномерных колебаний осциллятора с энергией ε

$$Q(t, \varepsilon) = \frac{2|\ddot{d}(t, \varepsilon)|^2}{3c^3}, \quad (\text{П2.1})$$

где $d(t, \varepsilon) = qx(t, \varepsilon)$ — дипольный момент осциллятора ($k = \omega_0 \sqrt{m/2D}$ — параметр потенциала Морзе; D — энергия связи; m — масса осциллятора). Перепишем формулу (П2.1) в безразмерных переменных $\rho = kx$ и $\tau = \omega_0 t$ и усредним по безразмерному периоду колебаний

$$\bar{T}^{(\text{Morse})} = T^{(\text{Morse})} \omega_0 = \frac{2\pi}{\sqrt{1-\bar{\varepsilon}}}, \quad (\text{П2.2})$$

где $\bar{\varepsilon} = \varepsilon/D$ — нормированная энергия. В результате получится выражение

$$\langle Q(t, \varepsilon) \rangle_T = \frac{4q^2 \omega_0^2 D}{3mc^3} \langle \dot{\rho}_{\tau^2}^2 \rangle_T. \quad (\text{П2.3})$$

Таким образом, необходимо вычислить среднее от квадрата безразмерной второй производной: $\langle \ddot{\rho}_{\tau^2}^2 \rangle_{\bar{T}}$. Это среднее можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \ddot{\rho}_{\tau^2}^2 \rangle_{\bar{T}} &= \frac{2}{\bar{T}} \int_{\rho_1(\bar{\varepsilon})}^{\rho_2(\bar{\varepsilon})} \frac{\ddot{\rho}^2}{\dot{\rho}} d\rho = 2 \frac{\sqrt{1-\bar{\varepsilon}}}{2\pi} I_M(\bar{\varepsilon}) = \\ &= 2 \frac{\sqrt{1-\bar{\varepsilon}}}{2\pi} \int_{\rho_1(\bar{\varepsilon})}^{\rho_2(\bar{\varepsilon})} \frac{[\exp(-2\rho) - \exp(-\rho)]^2}{\sqrt{\bar{\varepsilon} - 1 + 2\exp(-\rho) - \exp(-2)}} d\rho, \end{aligned} \quad (\text{П2.4})$$

где $\rho_1 = -\ln(1 + \sqrt{\bar{\varepsilon}})$ и $\rho_2 = -\ln(1 - \sqrt{\bar{\varepsilon}})$ — точки поворота, в которых скорость осциллятора обращается в ноль. Они соответствуют нулям подкоренного выражения в знаменателе правой части равенства (П2.4). При записи (П2.4) было учтено, что электромагнитный импульс закончился, и динамика осциллятора Морзе определяется только его потенциальной энергией, так что справедливо выражения для ускорения свободного осциллятора (1.75) и его скорости, следующее из (1.67).

Интеграл в правой части (П2.4) $I_M(\bar{\varepsilon})$ несложно вычислить, если использовать замену переменной:

$$\rho = -\ln(1 + \sqrt{\bar{\varepsilon}}y).$$

Тогда после элементарных преобразований находим:

$$I_M(\bar{\varepsilon}) = \bar{\varepsilon} \int_{-1}^1 \frac{y^2}{\sqrt{1-y^2}} dy = \frac{\pi}{2} \bar{\varepsilon}. \quad (\text{П2.5})$$

Подставляя правую часть (П2.5) в (П2.4) и полученное выражение в равенство (П2.3), приходим к формуле (1.77) ($\bar{\varepsilon} = \varepsilon/D$):

$$\langle Q(t, \varepsilon) \rangle_T = \frac{2q^2\omega_0^2 D}{3mc^3} \bar{\varepsilon} \sqrt{1-\bar{\varepsilon}}. \quad (\text{П2.6})$$



Литература

1. *Клышко Д.Н.* Физические основы квантовой электроники. М.: Наука, 1986, 294 с.
2. *Arustamyan M.G., Astapenko V.A.* Phase control of oscillator excitation under the action of ultra-short laser pulses. *Laser Physics*, 2008. V. 18, № 9, pp. 1031–1036.
3. *Астапенко В.А., Ромадановский М.С.* Возбуждение осциллятора Морзе сверхкоротким chirпированным импульсом. *ЖЭТФ*. 2010. Т. 137. Вып. 3. С. 429–436.
4. *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: ГИФМЛ, 1963, 1108 с.

2.1. КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ВЕЩЕСТВА И ТЕОРИЯ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ М. ПЛАНКА

До начала XX в. электромагнитное поле рассматривалось как классический объект. Это означает, что все его характеристики могут быть описаны с помощью непрерывных функций пространственно-временной точки. Такой подход адекватно описывал большинство известных к концу XIX в. экспериментальных фактов, за исключением одного: в рамках существовавших понятий не удавалось объяснить спектр теплового излучения. Напомним, что под тепловым излучением понимается излучение, находящееся в состоянии теплового равновесия с веществом. Свойства такого излучения не зависят от характеристик окружающей среды, а определяются исключительно свойствами самого электромагнитного поля. Поэтому исследование теплового излучения крайне важно для установления фундаментальных закономерностей, присущих электромагнитному полю. Классическая физика оказалась неспособной найти удовлетворительное теоретическое объяснение спектра теплового излучения $\rho_T(\omega)$. Более того, последовательный классический подход к этой проблеме предсказывал неограниченный рост функции $\rho_T(\omega)$ с увеличением частоты ω , так что пространственная плотность энергии теплового излучения u_T оказывалась бесконечно большой. Этот результат, связанный с использованием классического подхода в теории теплового излучения, получил название *ультрафиолетовой катастрофы*. Как показало дальнейшее развитие науки, ультрафиолетовая катастрофа является следствием принципиальной невозможности классической физики дать описание законов



микромира, поскольку она не учитывает важнейшего свойства материи: корпускулярно-волновой дуализм. Требовался принципиальный пересмотр классических понятий. Первый шаг в этом направлении был сделан М. Планком в его теории теплового излучения в статье 1900 г. Данный вопрос в большинстве учебных пособий излагается на основе квантования энергии радиационного (или полевого) осциллятора, что отнюдь не предполагалось М. Планком. Мы приведем здесь вывод, данный самим Планком, который рассматривал динамическое равновесие между электромагнитным полем и ансамблем гармонических осцилляторов, представляющих молекулы вещества [1]. Для получения функции $\rho_T(\omega)$ Планк использовал связь между спектральной плотностью энергии теплового излучения и средней энергией осциллятора среды, обладающего той же частотой ω :

$$\rho_T(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle E(\omega) \rangle_T. \quad (2.1)$$

Формула (2.1) может быть выведена в рамках классического рассмотрения, что и было сделано в разд. 1.3 настоящей книги [см. формулу (1.64)]. Из нее следует, что для нахождения спектральной плотности $\rho_T(\omega)$ достаточно получить явное выражение средней энергии осциллятора вещества на заданной частоте $\langle E(\omega) \rangle_T$ в состоянии термодинамического равновесия. Планк исходил из термодинамического соотношения

$$\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T}, \quad (2.2)$$

где S — энтропия; E — энергия; T — температура. Данная формула является определением абсолютной температуры, при этом температура предполагается измеренной в энергетических единицах (постоянная Больцмана $k_B = 1$), а энтропия оказывается безразмерной величиной.

Чтобы воспользоваться равенством (2.2), нужно найти энтропию системы как функцию ее энергии. Пусть вещество, находящееся в термодинамическом равновесии с излучением, состоит из N осцилляторов с собственной частотой ω . Тогда имеют место очевидные равенства:

$$E = N\varepsilon \quad (\varepsilon \equiv \langle E(\omega) \rangle_T); \quad S = Ns,$$

где s — энтропия, приходящаяся на один осциллятор среды. Для нахождения функции $S(E)$ Планк применил формулу Больцмана,

определяющую энтропию как логарифм статистического веса Γ макроскопического состояния системы с заданной энергией E :

$$S(E) = \ln \Gamma(E). \quad (2.3)$$

Напомним, что статистический вес макроскопического состояния равен числу микроскопических реализаций данного состояния.

Итак, задача свелась к определению статистического веса $\Gamma(E)$ макроскопического состояния вещества с заданной энергией E . В этом пункте Планк сделал свое революционное предположение о том, что энергия системы осцилляторов вещества изменяется дискретным образом:

$$E = P\hbar\omega, \quad (2.4)$$

где P — натуральное число; $\hbar\omega$ — элементарный квант энергии; $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-27}$ эрг · с — постоянная Планка. Равенство (2.4) потребовалось для того, чтобы получить явное выражение для энтропии. С учетом предположения (2.4) статистический вес заданного состояния системы осцилляторов, описывающих вещество, равен числу размещений P предметов по N ячейкам. Эту величину можно получить с помощью комбинаторики:

$$\Gamma = R = \frac{(N + P - 1)!}{P!(N - 1)!}. \quad (2.5)$$

С помощью формулы Стирлинга

$$N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N \sqrt{2\pi N},$$

равенства

$$P = \frac{E}{\hbar\omega}$$

и формул (2.3), (2.5) находим для энтропии, приходящейся на один осциллятор:

$$s(\varepsilon) = \left(1 + \frac{\varepsilon}{\hbar\omega}\right) \ln \left(1 + \frac{\varepsilon}{\hbar\omega}\right) - \frac{\varepsilon}{\hbar\omega} \ln \left(\frac{\varepsilon}{\hbar\omega}\right), \quad (2.6)$$

где $\varepsilon \equiv \langle E(\omega) \rangle_T$. При выводе (2.6) использовалось соотношение: $N \gg 1$.

Из определения (2.2) и аддитивности энергии и энтропии следует, что

$$\frac{ds}{d\varepsilon} = \frac{1}{T}.$$

Подставляя в последнее равенство выражение (2.6), получаем для средней энергии осциллятора вещества в состоянии теплового равновесия:

$$\varepsilon \equiv \langle E(\omega) \rangle_T = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}. \quad (2.7)$$

В пределе относительно малого кванта $\hbar\omega \ll T$ формула (2.7) дает классический результат для средней энергии осциллятора: $\langle E(\omega) \rangle_T \equiv T$ (выпала постоянная Планка $\hbar!$). В противоположном пределе $\hbar\omega \gg T$, когда дискретность изменения энергии становится существенной, получаем

$$\langle E(\omega) \rangle_T \equiv \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right).$$

В этом случае средняя энергия включает в себя экспоненциально малый фактор.

Используя равенства (2.1) и (2.7), приходим к формуле Планка для спектра теплового излучения:

$$\rho_T^{(P)}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}. \quad (2.8)$$

Как следует из приведенного вывода, Планк «проквантовал» энергию системы осцилляторов вещества (2.4), не делая никаких квантовых предположений относительно свойств электромагнитного излучения. Можно сказать, что квантовые свойства вещества отобразились на квантовые свойства излучения благодаря соотношению (2.1), которое является следствием термодинамического равновесия.

В низкочастотном пределе $\hbar\omega \ll T$, когда дискретность изменения энергии становится несущественным, выражение (2.8) переходит в формулу Рэлея—Джинса:

$$\rho_T^{(RJ)}(\omega) = \frac{\omega^2 T}{\pi^2 c^3}, \quad (2.9)$$



а в высокочастотном пределе $\hbar\omega \ll T$ — в формулу Вина:

$$\rho_T^{(W)}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right). \quad (2.10)$$

Обратим внимание на то, что в классическом пределе Рэлея—Джинса из выражения для спектральной плотности энергии теплового излучения (2.9) выпала постоянная Планка, т. е. в случае малых частот дискретность изменения энергии полевого осциллятора становится несущественной, и можно пользоваться формализмом классической физики.

Если использовать классическое выражение Рэлея—Джинса (2.9) для вычисления пространственной плотности энергии, то получается расходящийся интеграл

$$u_T^{(RJ)} = \int_0^{\infty} \rho_T^{(RJ)}(\omega) d\omega \propto \omega^3 \rightarrow \infty,$$

т. е. энергия теплового излучения в единице объема оказывается бесконечной. Данное противоречие получило название «ультрафиолетовой катастрофы», поскольку расходимость интеграла возникает из-за аномально большого вклада высоких частот. Ультрафиолетовая катастрофа послужила важным стимулом для пересмотра классических представлений о строении материи и создания квантовой теории излучения.

Формулу (2.9) удобно переписать через безразмерную функцию Планка:

$$F_P(x) = \frac{x^3}{\exp(x) - 1} \quad (2.11)$$

в виде

$$\rho_T(\omega) = \frac{T^3}{\pi^2 c^3 \hbar^2} F_P\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right). \quad (2.12)$$

График функции Планка $F_P(x)$ вместе с предельными случаями представлен на рис. 2.1.

Функция Планка достигает максимума при значении аргумента

$$x_{\max} = \frac{\hbar\omega_{\max}}{T} = 2,821.$$

Отсюда следует, что частота максимума спектральной плотности энергии теплового излучения линейно растет с температурой (закон смещения Вина) в соответствии с равенством

$$\omega_{\max} = \frac{2,82 T}{\hbar}, \quad (2.13)$$

где температура измерена в энергетических единицах.

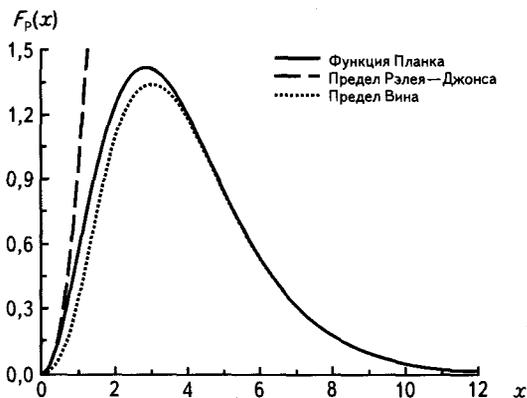


Рис. 2.1. Функция Планка $F_p(x)$ и ее предельные случаи

Пространственная плотность энергии теплового излучения равна

$$u_T = \int_0^{\infty} \rho_T(\omega) d\omega = \frac{T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} F_p(x) dx = \frac{4}{c} \sigma (T [K])^4, \quad (2.14)$$

где σ — постоянная Стефана—Больцмана,

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5,67 \cdot 10^{-5} \text{ г/с}^3 \cdot \text{град}^4. \quad (2.15)$$

При выводе правой части равенства (2.14) был использован табличный интеграл

$$\int_0^{\infty} F_p(x) dx = \frac{\pi^4}{15}.$$

Таким образом, как это видно из формулы (2.14), полная энергия теплового излучения, просуммированная по всему спектрально-



му диапазону, растет как четвертая степень температуры, оставаясь при этом конечной величиной.

Спектр излучения Солнца в видимой и инфракрасной области хорошо описывается формулой Планка для теплового излучения (2.12) для температуры $T = 5800 \text{ }^\circ\text{K}$ (рис. 2.2). Основным процесс в фотосфере Солнца, который приводит к формированию спектра излучения в этой диапозоне, является радиационный захват электрона атомом водорода: $e + \text{H} \leftrightarrow \text{H}^- + \hbar\omega$. Энергия связи электрона в отрицательном ионе водорода составляет $0,75 \text{ эВ}$, что соответствует длине волны фотона $1,65 \text{ мкм}$. Излучение более коротких длин волн солнечного спектра в видимом и инфракрасном диапазоне происходит при захвате электронов с неравной нулю кинетической энергией в связанное состояние иона H^- .

Для эффективной температуры солнечной поверхности $T = 5800 \text{ }^\circ\text{K}$ в соответствии с законом смещения Вина (2.13) можно получить значение энергии фотона, на которую приходится максимум в спектре излучения Солнца: $\hbar\omega_{\text{max}} \approx 1,49 \text{ эВ}$. Заметим, что функция распределения энергии теплового излучения по длинам волн имеет вид, отличный от (2.11) и (2.12) (с учетом замены $\omega = 2\pi c/\lambda$), поскольку в нее будет входить дополнительный множитель, пропорциональный λ^{-2} . В результате максимум спектра солнечного излучения приходится на длину волны $0,488 \text{ мкм}$, а не на $0,83 \text{ мкм}$, как следовало бы из вышеприведенной величины $\hbar\omega_{\text{max}}$.

Закон смещения Вина в терминах длины волны теплового излучения имеет вид:

$$\lambda_{\text{max}} T = b, \quad (2.13a)$$

где $b = 0,2898 \text{ см} \cdot \text{K}$ — постоянная Вина, откуда и следует значение для длины волны в максимуме солнечного спектра.

Мощность теплового излучения с единицы поверхности тела равна $S_T = cu_T/4$, откуда с учетом (2.14) получаем закон Стефана—Больцмана $S_T = \sigma T^4$. Применим эту формулу к излучению Солнца. Тогда с учетом значения солнечного радиуса ($R_C \approx 6,96 \cdot 10^6 \text{ км}$) находим для мощности излучения Солнца в модели теплового излучения $Q_C^{(T)} = 3,925 \cdot 10^{26} \text{ Вт}$, что всего на $1,8 \%$ больше точного значения. Полученную величину можно использовать для оценки интенсивности солнечного излучения на орбите Земли. Простой расчет дает $I_C \approx 0,14 \text{ Вт/см}^2$. Для сравнения заметим, что характерное значение интенсивности излучения лазера, работающего в режиме мо-

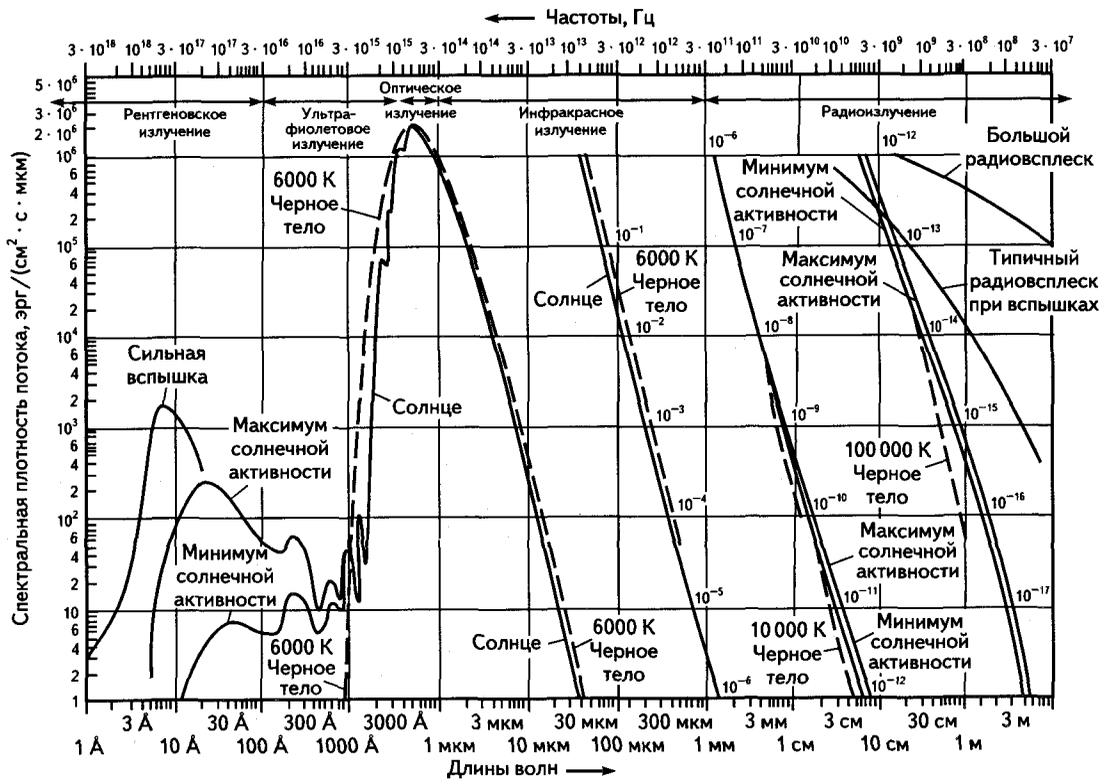


Рис. 2.2. Спектр излучения Солнца в широком диапазоне длин волн



дуляции добротности, составляет $I_{Q\text{-swit}} \cong 10^8$ Вт/см². Если применить закон Стефана—Больцмана к излучению Земли, то можно получить следующее эффективное значение температуры ее поверхности $T_3 \approx 249$ К.

2.2. ВЫВОД ФОРМУЛЫ ДЛЯ СПЕКТРА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВАНИИ КВАНТОВАНИЯ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Квантовые свойства излучения в явном виде были постулированы А. Эйнштейном при объяснении законов фотоэффекта в его знаменитой статье «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света», вышедшей в 1905 г. [2]. Эйнштейн исходил из выражения для энтропии излучения в пределе высоких частот, рассматривая ее как функцию объема. Им было показано, что эта функция совпадает с аналогичной зависимостью для идеального газа, если предположить, что излучение состоит из дискретных квантов энергии $\hbar\omega$. Эти кванты, по мысли Эйнштейна, локализованы в пространстве наподобие молекул идеального газа и могут поглощаться или излучаться молекулами среды только как целое.

Термин «фотон» (от древнегреч. — свет) для обозначения кванта электромагнитного поля было введено американским физиком и химиком Г. Льюисом в 1926 г. До этого момента, начиная с цитированной выше работы А. Эйнштейна 1905 г., был в ходу термин «квант энергии электромагнитного излучения».

Если вслед за Эйнштейном исходить из квантования энергии электромагнитного излучения, то можно получить формулу (2.8) для спектральной плотности энергии, не прибегая к вычислению энтропии ансамбля осцилляторов вещества, пользуясь исключительно свойствами электромагнитного поля [3]. Таким образом, базовое предположение заключается в том, что энергия E монохроматической составляющей излучения на частоте ω равна:

$$E(\omega) = N\hbar\omega = E_N, \quad (2.16)$$

где N — натуральное число, включая ноль, т. е. энергия поля складывается из дискретных порций (квантов) одинаковой величины $\hbar\omega$.



Подчеркнем, что здесь в отличие от формулы (2.4) речь идет об энергии электромагнитного поля, а не об энергии вещества. Соотношение (2.16) отражает факт квантования энергии излучения, никоим образом не вытекающий из классической картины мира. Поскольку произвольное электромагнитное поле с помощью преобразования Фурье можно разложить на монохроматические составляющие (радиационные или полевые осцилляторы), то закон квантования (2.16) имеет универсальное значение.

В случае теплового излучения, находящегося в состоянии термодинамического равновесия, вероятность полевого осциллятора иметь энергию E_N определяется формулой Больцмана

$$w_N = \frac{\exp(-E_N/T)}{\sum_{N'} \exp(-E_{N'}/T)}, \quad (2.17)$$

где T — температура в энергетических единицах. Знаменатель в правой части равенства (2.17) отражает нормировку вероятности. Используя формулу (2.17), для средней энергии полевого осциллятора заданной частоты ω с учетом квантования энергии (2.16) находим

$$\langle E(\omega) \rangle_T = \sum_{N=0}^{\infty} w_N E_N = \hbar\omega \langle N(\omega) \rangle_T = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}, \quad (2.18)$$

где $\langle N(\omega) \rangle_T$ — среднее число квантов энергии осциллятора для заданной частоты и температуры,

$$\langle N(\omega) \rangle_T = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}. \quad (2.19)$$

При выводе (2.18) были использованы формула для суммы убывающей геометрической прогрессии:

$$\sum_{N=0}^{\infty} \exp(-Nx) = \frac{1}{1 - \exp(-x)} \quad (2.20)$$

и выражение для ряда:

$$\sum_{N=0}^{\infty} N \exp(-Nx) = \frac{\exp(-x)}{[1 - \exp(-x)]^2}, \quad (2.21)$$



которое может быть получено из формулы (2.20) дифференцированием обеих частей этого функционального равенства по переменной x .

Проанализируем выражение (2.18) в различных частотных диапазонах. Если частота радиационного осциллятора мала, так что выполняется неравенство $\hbar\omega \ll T$, то выражение (2.18) дает

$$\left\langle E \left(\omega \ll \frac{T}{\hbar} \right) \right\rangle_T \cong T. \quad (2.22)$$

Формула (2.22) описывает известный факт классической физики: в состоянии теплового равновесия на одну осцилляторную степень свободы приходится энергия, равная температуре.

Заметим, что равенство (2.22) может быть получено непосредственно из определения средней энергии в предположении *непрерывного* изменения энергии осциллятора. Действительно, с помощью распределения Больцмана имеем

$$\langle E \rangle_T = \int_0^{\infty} dE w_T(E) E = \int_0^{\infty} dE \frac{\exp(-E/T)}{T} E = T. \quad (2.23)$$

Выражения для средней энергии осциллятора (2.22) и (2.23) использовали Рэлей и Джинс при получении классической формулы спектральной плотности энергии теплового излучения (2.9), приводящей к «ультрафиолетовой катастрофе». Отметим, что последнее обстоятельство является следствием независимости классической средней энергии осциллятора (2.23) от его частоты.

В противоположном предельном случае высоких частот, когда величина кванта энергии $\hbar\omega$ много больше температуры, правая часть равенства (2.18) дает

$$\left\langle E \left(\omega \gg \frac{T}{\hbar} \right) \right\rangle_T \cong \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right). \quad (2.24)$$

Наличие фактора $\exp(-\hbar\omega/T)$ «обрезает» вклад больших частот в энергию теплового излучения, так что «ультрафиолетовая катастрофа» ликвидируется. Использование выражения (2.24) приводит к формуле Вина (2.10) для спектральной плотности энергии теплового излучения.



Общее выражение для пространственно-спектральной плотности энергии электромагнитного поля можно представить в виде

$$\rho(\omega) = \frac{du}{d\omega} = \langle E(\omega) \rangle \frac{dN(\omega)}{Vd\omega}, \quad (2.25)$$

где u — пространственная плотность энергии излучения; $\langle E(\omega) \rangle$, $dN(\omega)/d\omega$ — средняя энергия и спектральная плотность состояний радиационных осцилляторов в заданном объеме V .

В дальнейшем будем предполагать, что полевой (или радиационный) осциллятор представляет собой бегущую плоскую волну. Разложение электромагнитного поля по таким осцилляторам или модам математически соответствует разложению его вектора-потенциала в пространственный ряд Фурье:

$$A(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha k} [A_{\alpha k}(t)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + A_{\alpha k}^*(t)e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}], \quad (2.26)$$

где α — индекс поляризации электромагнитного поля; \mathbf{k} — волновой вектор бегущей плоской волны. Для простоты будем предполагать, что объем, занимаемый полем, выбран в виде прямоугольного параллелепипеда со сторонами L_x, y, z . Тогда волновой вектор поля \mathbf{k} принимает следующие дискретные значения:

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi n_x}{L_x}, \frac{2\pi n_y}{L_y}, \frac{2\pi n_z}{L_z} \right), \quad (2.27)$$

где n_x, y, z — целые числа, рассматриваемый объем, очевидно, равен $V = L_x L_y L_z$.

С помощью формулы (2.27) можно получить выражение для плотности состояний электромагнитного поля в пространстве волновых векторов (\mathbf{k} -пространстве):

$$d\Gamma = \frac{d\mathbf{k}}{\Delta} = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} = \frac{Vd\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (2.28)$$

где Δ — объем элементарной ячейки в \mathbf{k} -пространстве,

$$\Delta = \frac{(2\pi)^3}{V}.$$



В данном разделе рассматривается *свободное* электромагнитное поле (электрические заряды и токи отсутствуют). В этом случае удобно выбрать следующую калибровку вектора-потенциала:

$$\varphi = 0; \quad \operatorname{div} \mathbf{A} = 0, \quad (2.29)$$

где φ — скалярный потенциал.

Связь напряженностей электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} полей с векторным потенциалом в калибровке (2.29) дается равенствами:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (2.30)$$

где c — скорость света. Из второго уравнения в формуле (2.29) вытекает поперечный характер свободного электромагнитного поля в вакууме:

$$\mathbf{e}_{\alpha k} \mathbf{k} = 0, \quad (2.31)$$

где $\mathbf{e}_{\alpha k}$ — единичный вектор поляризации поля.

Из уравнений Максвелла с учетом калибровки (2.29) стандартным образом получается волновое уравнение для векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Подставляя в волновое уравнение разложение (2.26), получаем

$$\frac{\partial^2 A_{\alpha k}}{\partial t^2} + |\mathbf{k}|^2 c^2 A_{\alpha k} = 0. \quad (2.32)$$

Равенство (2.32) представляет собой уравнение для гармонического осциллятора с собственной частотой

$$\omega_k = |\mathbf{k}|c, \quad (2.33)$$

чем и оправдывается название *полевой осциллятор*. Таким образом, полевой (или *радиационный*) осциллятор электромагнитного излучения полностью определяется волновым вектором \mathbf{k} и вектором поляризации $\mathbf{e}_{\alpha k}$, причем в силу поперечности свободного электромагнитного поля на каждый волновой вектор приходится два поляризаационных состояния, т. е. два полевых осциллятора.

Чтобы найти выражение для спектральной плотности состояний радиационных осцилляторов $dN(\omega)/d\omega$, заметим, что из формулы



(2.33) вытекает следующее выражение для трехмерного дифференциала dk :

$$dk = \frac{\omega^2}{c^3} d\omega d\Omega_k, \quad (2.34)$$

где $d\Omega_k$ — элемент телесного угла в k -пространстве. С помощью (2.34) формулу (2.28) можно переписать в виде

$$d\Gamma = \frac{V\omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi)^3 c^3}. \quad (2.35)$$

Отсюда для спектральной плотности состояний радиационных осцилляторов $dN(\omega)/d\omega$ находим:

$$\frac{dN(\omega)}{d\omega} = 2 \int_{\Omega} \frac{d\Gamma}{d\omega} = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (2.36)$$

В формуле (2.36) было произведено интегрирование по телесному углу волнового вектора в силу полной изотропии теплового излучения. Фактор 2 перед знаком интеграла учитывает две возможные поляризации поперечного электромагнитного поля. Подставляя выражения (2.18) и (2.36) в равенство для спектральной энергии поля (2.25), получаем формулу Планка (2.8).

Отметим, что спектральная плотность состояний (2.36) получена для электромагнитного поля в вакууме. При наличии среды выражение (2.36) должно быть изменено с учетом электромагнитных свойств вещества. Так, если показатель преломления среды изменяется в пространстве периодическим образом с периодом порядка длины волны на рассматриваемой частоте (фотонный кристалл), то в спектральной плотности осцилляторов появляются фотонные запрещенные зоны, т. е. области, в которых плотность состояний электромагнитного поля равна нулю. В фотонных запрещенных зонах невозможно существование электромагнитной волны, так же как в электронных запрещенных зонах невозможно существование носителя заряда.

Таким образом, из выражения (2.36) следует, что множитель перед средней энергией осциллятора в формуле (2.1) представляет собой не что иное, как спектральную плотность состояний электромагнитного поля в единице объема.



Итак, выражение для спектра теплового излучения, согласующееся с экспериментальными данными во всем частотном диапазоне, было получено М. Планком в предположении квантования энергии осциллятора вещества на рубеже XIX и XX вв. Формула Планка может быть также выведена на основании предположения о квантовании энергии электромагнитного поля, которое было высказано А. Эйнштейном в 1905 г. Строгая математическая теория квантованного поля была создана существенно позже. Она базируется на замене числовых функций, описывающих электромагнитный потенциал в классической физике, на операторные величины. Эта процедура называется *квантованием поля*. Таким образом, учитывается наличие у электромагнитного излучения корпускулярных свойств. Квантованию электромагнитного поля мы предпослём квантование гармонического осциллятора — модельного объекта, широко применяющегося в различных областях физики, в том числе в теории электромагнитного излучения. Взаимодействие классического осциллятора с электромагнитным полем подробно рассматривалось в гл. 1.

2.3. КВАНТОВАНИЕ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Выражение для полной энергии классического осциллятора дается известной формулой (1.2). Как уже упоминалось, при переходе от классической механики к квантовой каждой наблюдаемой на эксперименте физической величине ставится в соответствие оператор. Так, энергии в квантовой механике отвечает гамильтониан (или оператор Гамильтона) \hat{H} , а импульсу и координате — операторы \hat{p} и \hat{x} . Напомним, что шляпкой над символом физической величины принято обозначать оператор. Таким образом, гамильтониан гармонического осциллятора равен

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 \hat{x}^2}{2}. \quad (2.37)$$

Первое слагаемое в правой части равенства (2.37) отвечает оператору кинетической энергии, а второе слагаемое описывает оператор потенциальной энергии.



В классической аналитической механике принято рассматривать функцию Гамильтона (классический аналог гамильтониана) как функцию обобщенных координат и импульсов. (Заметим, что обобщенная координата и импульс не всегда равняются обычной механической координате и импульсу.) Для обозначения обобщенной координаты обычно используется буква q , а для обобщенного импульса — та же буква p . Обобщенные координата и импульс называются *каноническими переменными*. В теоретической механике показывается, что справедливы уравнения, связывающие производные по времени от обобщенной координаты и импульса с функцией Гамильтона:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.38)$$

Здесь точкой обозначена производная по времени. При записи (2.38) подразумевается наличие у системы, вообще говоря, нескольких степеней свободы, которым отвечают i -е проекции обобщенной координаты и импульса. Заметим, что второе уравнение в (2.38) соответствует второму закону Ньютона, а первое уравнение — аналог определения скорости.

Уравнения (2.38) называются уравнениями Гамильтона. При переходе к квантовой механике они должны быть заменены операторными уравнениями, в которых вместо функции Гамильтона фигурирует гамильтониан, определяемый в случае гармонического осциллятора равенством (2.37). Тогда из первого уравнения (2.38) следует операторное равенство

$$\hat{q} = \frac{\hat{p}}{m},$$

подставляя которое в операторный аналог второго равенства (2.38), находим

$$\hat{q} + \omega_0^2 \hat{q} = 0, \quad (2.39)$$

где \hat{q} — оператор обобщенного ускорения. Равенство (2.39) является операторным аналогом классического уравнения гармонического осциллятора в терминах обобщенной координаты. Оно было решено в 1925 г. В. Гейзенбергом еще до открытия уравнения Шредингера с помощью *матричного метода*. Суть матричного метода заклю-



чается в замене операторов физических величин их матричными элементами. Матричный элемент a_{mn} отвечает паре энергетических состояний m и n , характеризуемых энергиями E_n и E_m . Если индексы m и n пробегает дискретный ряд значений, то подразумевается наличие у системы дискретного энергетического спектра. Отметим, что опытные данные о наличии у реальных микрообъектов дискретного энергетического спектра послужили экспериментальным основанием для создания квантовой физики. Переходу между двумя уровнями энергии отвечает собственная частота перехода

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}. \quad (2.40)$$

При зарождении квантовой механики в матричной форме частота перехода (2.40) была экспериментальным параметром, определявшим логику построения матричного квантово-механического формализма для систем с дискретным энергетическим спектром. В рамках этого формализма имеют место следующие соотношения между матричными элементами обобщенной координаты, обобщенной скорости и обобщенного ускорения:

$$(\ddot{q})_{mn} = i\omega_{mn} (\dot{q})_{mn} = -\omega_{mn}^2 q_{mn}. \quad (2.41)$$

Соотношения (2.41) следуют из временных уравнений для матричных элементов, которые мы здесь не выписываем. Подставляя (2.41) в (2.39), находим [4]:

$$(\omega_{mn}^2 - \omega_0^2)q_{mn} = 0. \quad (2.42)$$

Из полученного уравнения вытекает равенство нулю всех матричных элементов q_{mn} за исключением тех, у которых $\omega_{mn} = \pm\omega_0$. Если пронумеровать уровни энергии гармонического осциллятора таким образом, что ближайшим уровням отвечает частота перехода $\pm\omega_0$, то отличными от нуля матричными элементами обобщенной координаты будут $\omega_{n, n \pm 1}$.

По физическому смыслу обобщенная координата является вещественной величиной, что приводит к симметричности матрицы q_{mn} : $q_{mn} = q_{nm}$.

Теперь необходимо воспользоваться коммутационным соотношением между оператором координаты и оператором скорости, вы-



текающим из коммутационного соотношения между обобщенной координатой и обобщенным импульсом:

$$[\hat{p}, \hat{q}] \equiv \hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p} = -i\hbar, \quad (2.43)$$

где $\hbar = h/2\pi \equiv 1,054 \cdot 10^{-27}$ эрг · с — «перечеркнутая» постоянная Планка. Из равенства (2.43) следует, что коммутатор координаты и импульса, хотя и мал, но не равен нулю. Неравенство нулю операторов двух физических величин означает, что они не могут быть измерены одновременно. Таким образом, обобщенная координата и импульс одновременно не измеримы. Если в правой части равенства (2.43) постоянную Планка положить равной нулю, то мы имеем классический предел, в котором квантовые свойства физических величин оказываются несущественными, а соответствующие операторы коммутируют.

Из формулы (2.43) следует, что

$$[\hat{q}, \hat{q}] \equiv \hat{q}\hat{q} - \hat{q}\hat{q} = \frac{-i\hbar}{m}. \quad (2.44)$$

Равенство (2.44) в матричной форме приобретает вид

$$(\hat{q}\hat{q})_{mn} - (\hat{q}\hat{q})_{mn} = \frac{-i\hbar}{m} \delta_{mn}, \quad (2.45)$$

где δ_{mn} — символ Кроннекера, равные единице, если индексы совпадают и нулю — в противном случае. Если теперь воспользоваться правилом умножения матриц, соотношениями (2.41), симметричностью матрицы обобщенной координата, то для $m = n$ из (2.45) можно получить

$$i \sum_k (\omega_{nk} q_{nk} q_{kn} - q_{nk} \omega_{kn} q_{kn}) = 2i \sum_k \omega_{nk} q_{nk}^2 = -i \frac{\hbar}{m}. \quad (2.46)$$

Здесь в сумме по k отличны от нуля слагаемые с $k = n \pm 1$, как это следует из уравнения (2.42). Учитывая это, приходим к равенству

$$q_{n+1, n}^2 - q_{n, n-1}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}. \quad (2.47)$$

Отсюда следует, что квадраты матричных элементов координаты гармонического осциллятора образуют геометрическую прогрессию. Поскольку члены этой прогрессии должны быть неотрицательными



числами, то существует первый ее член $q_{1,0}$, а все матричные элементы координаты с меньшими индексами нужно положить равными нулю, начиная с члена $q_{0,-1}$. Тогда из равенства (2.47) для ненулевых матричных элементов гармонического осциллятора получается следующее выражение

$$q_{n,n-1} = q_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}}. \quad (2.48)$$

Вычислим теперь с помощью (2.41), (2.48) и соотношения

$$\hat{q} = \frac{\hat{p}}{m}$$

матричные элементы гамильтониана (2.37). Результат вычислений дается равенствами

$$H_{nn} = E_n = \frac{m}{2} [\dot{q}_{nn}^2 + \omega_0^2 q_{nn}^2] = \frac{m}{2} \sum_k (\omega_0^2 + \omega_{nk}^2) q_{kn}^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0. \quad (2.49)$$

Из полученного выражения следует, что энергетический спектр гармонического осциллятора является эквидистантным, т. е. уровни энергии разделены одним и тем же интервалом $\hbar\omega_0$, который соответствует кванту энергии колебания на собственной частоте. Число n в равенствах (2.49) пробегает натуральный ряд значений, включая ноль. Оно соответствует числу квантов энергии в данном состоянии. Состояние с $n = 0$ называется основным, или *вакуумным*, поскольку в нем отсутствует возбуждение осциллятора. Характерно, однако, что в вакуумном состоянии энергия осциллятора не равна нулю:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

Как известно, наряду с матричной формулировкой в квантовой механике имеется волновая формулировка, в которой физическая система описывается волновой функцией ψ , являющейся решением уравнения Шредингера. Волновой подход получил большее распространение из-за своей лучшей приспособленности для решения практических задач. Стационарное (не зависящее от времени) уравнение

Шредингера является математической задачей на собственные числа и собственные функции. В общем случае оно имеет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.50)$$

Решение (2.50) заключается в определении собственных значений энергии E_n (собственных чисел) и соответствующих им собственных волновых функций ψ_n . В случае гармонического осциллятора с гамильтонианом (2.37) уравнение (2.50) переписывается в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m\omega_0^2 q^2}{2} - E \right) \psi. \quad (2.51)$$

При записи (2.51) было использовано выражение для оператора импульса

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dq}$$

в координатном представлении. В дальнейшем рассмотрении задачи о квантовом осцилляторе удобно ввести безразмерную обобщенную координату

$$\tilde{q} = \frac{q}{q_v} = \sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}} q, \quad (2.52)$$

где $\sqrt{\hbar/2m\omega_0}$ — обобщенная координата вакуумных колебаний. В терминах безразмерной координаты уравнение (2.51) принимает вид

$$\psi'' = \left(\tilde{q}^2 - \frac{2E}{\hbar\omega_0} \right) \psi, \quad (2.53)$$

где два штриха означают вторую производную по безразмерной координате \tilde{q} . Для решения уравнения (2.53) делается подстановка

$$\psi = \exp\left(-\frac{\tilde{q}^2}{2}\right) \varphi(\hat{q}) \quad (2.54)$$

и вводится обозначение

$$\frac{2E}{\hbar\omega_0} - 1 = 2n.$$

В результате приходим к уравнению

$$\varphi'' - 2\bar{q}\varphi' + 2n\varphi = 0. \quad (2.55)$$

Для того чтобы (в соответствии с физическим смыслом) функция ψ убывала на бесконечности, необходимо, чтобы решение уравнения (2.55) обращалось в бесконечность при $\bar{q} \rightarrow \infty$ не быстрее конечной степени \bar{q} . Можно показать, что для выполнения этого условия параметр n должно быть целым положительным числом, включая ноль.

В результате приходим к выводу, что собственные значения уравнения Шредингера (2.51), соответствующие энергиям гармонического осциллятора E_n , даются формулой (2.49), полученной в рамках матричного метода.

Решение уравнения (2.55) дается полиномами Эрмита

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2). \quad (2.56)$$

Таким образом, для волновых функций гармонического осциллятора получается выражение

$$\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \exp\left\{-\frac{m\omega_0}{2\hbar} q^2\right\} H_n\left(q\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\right). \quad (2.57)$$

При выводе (2.57) было использовано условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(q) dq = 1. \quad (2.58)$$

Используя полученные волновые функции и определение матричного элемента координаты в виде интеграла

$$q_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(q) q \psi_n(q) dq, \quad (2.59)$$

можно получить те же выражения (2.48) для матричных элементов $q_{m,n}$, отличные от нуля только для $m = n \pm 1$. Это равенство, связывающее пару состояний, для которых матричный элемент обобщенной координаты отличен от нуля, называется *правилом отбора* для гармонического осциллятора.



Графики волновых функций квантованного гармонического осциллятора (2.57) приведены на рис. 2.3 для трех значений целочисленного параметра n , описывающего число квантов энергии осциллятора согласно формуле (2.49). Абсцисса данного рисунка отвечает безразмерной обобщенной координате (2.52).

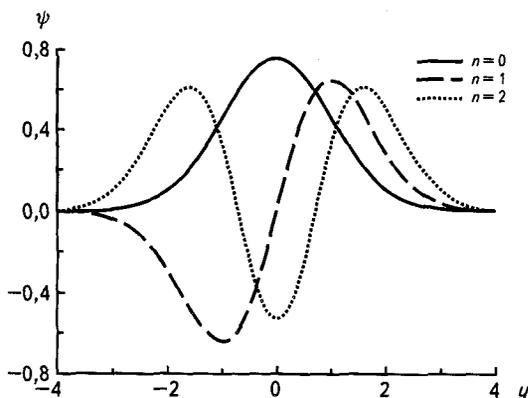


Рис. 2.3. Волновые функции квантованного гармонического осциллятора

Из рис. 2.3 видно, что число квантов энергии равно количеству нулей волновой функции гармонического осциллятора, причем основное состояние ($n = 0$) не имеет нулей. С ростом числа квантов волновая функция начинает сильнее осциллировать, при этом максимальное и минимальное значения обобщенной координаты увеличиваются.

2.4. КАНОНИЧЕСКОЕ КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Квантование электромагнитного поля означает такое его описание, при котором на математическом уровне проявляются квантовые свойства, обнаруженные экспериментально. Основное квантовое свойство излучения дается равенством (2.16), означающим, что энергия поля E на частоте ω представляет собой целое положительное число N элементарных квантов энергии, каждый из которых равен $\hbar\omega$. Как уже говорилось, выражение для энергии осциллятора вещества (2.4) было введено в физику М. Планком.



На случай электромагнитного поля оно было обобщено А. Эйнштейном. На самом деле, как мы увидим в дальнейшем, равенство (2.16) должно быть уточнено. Тем не менее оно передает главную квантовую закономерность: энергия электромагнитного поля на заданной частоте изменяется дискретным образом. Квант энергии электромагнитного поля получил название *фотона*. Таким образом, электромагнитное поле может быть представлено в виде совокупности фотонов, подобно тому, как идеальный газ является совокупностью молекул.

Квантование электромагнитного поля, базирующееся на его описании в терминах обобщенных координат и обобщенных импульсов, называется *каноническим*. Это название проистекает из того факта, что в теоретической механике обобщенные координаты и импульсы являются каноническими переменными, подчиняющимися уравнениям Гамильтона (2.38). Для реализации канонического квантования воспользуемся выражением для векторного потенциала свободного электромагнитного поля (поля излучения) в виде Фурье-разложения по плоским волнам (2.26). Канонические переменные поля определяются через коэффициенты Фурье-разложения A_{ak} согласно равенствам [5]

$$q_{ak} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (A_{ak} + A_{ak}^*); \quad (2.60)$$

$$p_{ak} = -i\omega \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (A_{ak} - A_{ak}^*), \quad (2.61)$$

где V — объем, занимаемый электромагнитным полем. Как видно из этих формул, обобщенные координаты и импульсы являются вещественными величинами, которые не совпадают с механическим импульсом и пространственной координатой. Можно показать, что обобщенный импульс (2.61) выражается через напряженность электрического поля в стоячей волне, а обобщенная координата (2.60) — через напряженность магнитного поля. В гауссовой системе единиц канонические переменные имеют размерность

$$[q] = c \cdot \sqrt{\text{эрг}}; \quad [p] = \sqrt{\text{эрг}},$$

не совпадающую, естественно, с размерностью пространственной координаты и механического импульса.



Выражая из формул (2.60) и (2.61) комплексный векторный потенциал $A_{\alpha k}$ и подставляя результат в (2.26), находим:

$$A = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} \sum_{\alpha k} \left[q_{\alpha k} \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{1}{\omega} p_{\alpha k} \sin(\mathbf{k}\mathbf{r}) \right]. \quad (2.62)$$

Итак, мы получили искомое представление векторного потенциала в канонических переменных. Напряженность электрического и магнитного полей выражается через векторный потенциал согласно формулам:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad (2.63)$$

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (2.64)$$

При записи (2.63) была использована калибровка электромагнитного поля, в которой $\varphi = 0$ (φ — скалярный потенциал). Функция Гамильтона поля определяется интегралом

$$H = \int \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi} dV. \quad (2.65)$$

Подставляя в (2.65) выражения для напряженностей электрического и магнитного полей через векторный потенциал (2.62), находим:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha k} (p_{\alpha k}^2 + \omega_k^2 q_{\alpha k}^2). \quad (2.66)$$

В классической механике функция Гамильтона (или энергия) гармонического осциллятора дается выражением (1.2). Сравнивая формулы (1.2) и (2.66), приходим к выводу о том, что поле в канонических переменных представляется в виде набора гармонических осцилляторов с собственными частотами ω_k и массами, равными единице. Каждый такой осциллятор отвечает плоской волне с заданной поляризацией и волновым вектором, которая называется *модой* поля. Таким образом, формула (2.66) дает разложение свободного электромагнитного поля на т.н. радиационные (или полевые) осцилляторы.

Радиационный осциллятор в классической теории является образом фотона при квантовом описании поля. Здесь следует отметить, что данная аналогия не является полной: как известно, масса фотона равна нулю, в то время как масса эквивалентного осциллятора равняется единице.



Каноническое квантование электромагнитного поля базируется на использовании коммутационного соотношения между обобщенной координатой и обобщенным импульсом гармонического осциллятора, которое с учетом зависимости радиационного осциллятора от волнового вектора и поляризации может быть переписано в виде:

$$[\hat{p}_{\alpha k}, \hat{q}_{\alpha' k'}] = -i\hbar \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{kk'}. \quad (2.67)$$

Отсюда, в частности, следует, что коммутатор не равен нулю для одинаковой поляризации и одинаковых волновых векторов радиационных осцилляторов. Использование символа Кроннекера для волнового вектора подразумевает его дискретное изменение при квантовании поля в пространстве ограниченного объема.

Подставляя операторы канонических переменных в выражение для векторного потенциала электромагнитного поля (2.62), получаем квантованный векторный потенциал, который по формулам (2.63), (2.64) определяет квантованную напряженность электрического и магнитного полей. Прилагательное «квантованный» в данном случае означает, что соответствующие функции из обычных числовых функций превращаются в операторные. В результате такой замены классическая функция Гамильтона (2.65) превращается в гамильтониан квантованного электромагнитного поля:

$$\hat{H} = \int \frac{\hat{E}^2 + \hat{H}^2}{8\pi} dV, \quad (2.68)$$

который в канонических переменных имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha k} (\hat{p}_{\alpha k}^2 + \omega_k^2 \hat{q}_{\alpha k}^2) = \sum_{\alpha k} \hat{H}_{\alpha k}. \quad (2.69)$$

Гамильтониан электромагнитного поля (2.69) является суммой гамильтонианов $\hat{H}_{\alpha k}$ независимых радиационных осцилляторов, совпадающих с точностью до замены массы $m \rightarrow 1$ и собственной частоты $\omega_0 \rightarrow \omega_{\alpha k}$ с гамильтонианом гармонического осциллятора (2.37). Отсюда следует, что собственные значения операторов $\hat{H}_{\alpha k}$ совпадают с собственными значениями (2.69) с учетом зависимости от волнового вектора и поляризации:

$$E = \sum_{\alpha k} \left(N_{\alpha k} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k, \quad (2.70)$$



где $N_{\alpha k}$ — число фотонов в моде электромагнитного поля с заданным волновым вектором и поляризацией. Это число является аналогом числа квантов возбуждения гармонического осциллятора n .

Таким образом, выражение для собственного значения энергии квантованного электромагнитного поля (2.70) в явном виде свидетельствует о его фотонной структуре.

Исследование поведения квантованного электромагнитного поля и его взаимодействия с заряженными частицами составляет предмет *квантовой электродинамики*.

Принципиальное отличие выражения (2.70) от формулы Планка—Эйнштейна (2.4) заключается в наличии слагаемого $1/2$ в круглых скобках. Это слагаемое называется вакуумным, поскольку оно остается даже тогда, когда все числа фотонов $N_{\alpha k}$ равны нулю (вакуумное состояние поля). Вакуумное слагаемое соответствует нулевым колебаниям, отвечающим флуктуациям напряженности электромагнитного поля, которые существуют даже в вакууме. Поскольку число радиационных осцилляторов поля, занимающего пространство бесконечного объема, бесконечно велико, то энергия вакуумного состояния оказывается также бесконечной. Бесконечность энергии вакуумного состояния электромагнитного поля является одной из трудностей квантовой электродинамики. Если интересоваться только собственными значениями энергии поля, то эту трудность можно обойти просто вычеркиванием вакуумного слагаемого в энергии, после чего мы приходим к исходной формуле Планка—Эйнштейна (2.4), полученной эвристическим путем.

Помимо энергии электромагнитного поля квантуется также его импульс, определяемый в классическом случае выражением

$$\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi c} \int [\mathbf{E}\mathbf{H}] dV, \quad (2.71)$$

где квадратные скобки означают векторное произведение. Подставляя сюда квантованные выражения для напряженностей электрического и магнитного полей, находим собственные значения оператора импульса электромагнитного поля:

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha k} \left(N_{\alpha k} + \frac{1}{2} \right) \hbar \mathbf{k}. \quad (2.72)$$

Здесь, так же как и в выражении для собственного значения энергии поля (2.70), присутствует вакуумное слагаемое, которое может



быть опущено в рамках настоящего рассмотрения, хотя, строго говоря, оно свидетельствует об отсутствии логической замкнутости квантовой электродинамики.

Как следует из формулы (2.72), импульс фотона определяется равенством

$$\mathbf{p}_{\text{ph}} = \hbar \mathbf{k}, \quad (2.73)$$

а энергия фотона дается известной формулой

$$\varepsilon_{\text{ph}} = \hbar \omega, \quad (2.74)$$

которая вытекает из выражения (2.70) для собственного значения энергии квантованного электромагнитного поля. С учетом (2.73) и (2.74) легко получить соотношение:

$$\varepsilon_{\text{ph}}^2 - \mathbf{p}_{\text{ph}}^2 c^2 = \hbar^2 (\omega_k^2 - \mathbf{k}^2 c^2) = 0, \quad (2.75)$$

поскольку $\omega_k = |\mathbf{k}|c$ для свободного электромагнитного излучения в вакууме. С другой стороны, релятивистская формула для энергии гласит

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}.$$

Сравнивая ее с равенствами (2.75), приходим к выводу, что *масса фотона равна нулю*.

По аналогии с матричными элементами оператора координаты гармонического осциллятора (2.52) можно найти матричные элементы операторов обобщенных координат электромагнитного поля. Соответствующие формулы имеют вид:

$$\langle N_{\alpha k} | \hat{q}_{\alpha k} | N_{\alpha k} - 1 \rangle = \langle N_{\alpha k} - 1 | \hat{q}_{\alpha k} | N_{\alpha k} \rangle = \sqrt{\frac{N_{\alpha k} \hbar}{2\omega_k}} \mathbf{e}_{\alpha k}. \quad (2.76)$$

Здесь $\mathbf{e}_{\alpha k}$ — единичный вектор поляризации электромагнитного поля. Матричные элементы для переходов между различными значениями волнового вектора и поляризации фотонов равны нулю. При записи (2.76) были использованы обозначения для кет- ($|\dots\rangle$) и бра- ($\langle \dots|$) векторов Дирака, которые являются более компактной формой записи волновых функций, описывающих состояния физической системы.



В состояниях электромагнитного поля с фиксированным числом фотонов $|N_{\alpha k}\rangle$ энергия поля имеет определенное значение, поэтому такие состояния называются *энергетическими*. Для энергетических состояний справедливо стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}|N_{\alpha k}\rangle = E_{\alpha k}|N_{\alpha k}\rangle = \left(N_{\alpha k} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_k|N_{\alpha k}\rangle. \quad (2.77)$$

Энергетическое состояние поля является далеко не единственным и даже весьма экзотичным с точки зрения его экспериментального приготовления. Оно естественным образом возникает в процессе квантования и имеет наглядную физическую интерпретацию, чем и объясняется широкое использование этих состояний при изложении квантовой механики фотона.

Изменение во времени энергетического состояния описывается временным уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial|N_{\alpha k}\rangle}{\partial t} = \hat{H}|N_{\alpha k}\rangle. \quad (2.78)$$

Решение данного уравнения для гамильтониана, не зависящего от времени, можно представить в виде:

$$|N_{\alpha k}, t\rangle = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)|N_{\alpha k}, t=0\rangle = \hat{S}(t)|N_{\alpha k}, t=0\rangle, \quad (2.79)$$

где $\hat{S}(t)$ — оператор эволюции квантовой системы,

$$\hat{S}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right). \quad (2.80)$$

В общем случае оператор эволюции имеет вид

$$\hat{S}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}dt\right), \quad (2.80a)$$

где гамильтониан \hat{H} , вообще говоря, зависит от времени.

Для энергетического состояния электромагнитного поля временная зависимость определяется равенством

$$|N_{\alpha k}, t\rangle = \exp\left\{-i\left(N_{\alpha k} + \frac{1}{2}\right)\omega_k t\right\}|N_{\alpha k}, t=0\rangle. \quad (2.81)$$

При выводе формулы (2.81) из (2.79) было учтено соотношение (2.77).



Выражение (2.81) говорит о том, что в ходе временной эволюции энергетическое состояние умножается на фазовый множитель, модуль которого равен единице. Характер состояния электромагнитного поля, определяемый равенством (2.77), при этом не меняется. Иными словами, энергетическое состояние в процессе временной эволюции продолжает оставаться энергетическим (т. е. состоянием с определенной энергией).

Явный вид кет-вектора Дирака $|\dots\rangle$, описывающего состояние электромагнитного поля, зависит от того, какая переменная выбрана в качестве аргумента, или, как говорят, от *представления* вектора состояния. Если в качестве аргумента выбрано число фотонов в моде поля N (или, что то же самое, число квантов возбуждения в радиационном осцилляторе с заданным волновым вектором и поляризацией), то говорят о *представлении чисел заполнения*. В случае, когда аргументом служит обобщенная координата, представление называется *координатным*. Существуют и другие представления векторов состояний. Явный вид энергетического состояния наиболее прост в представлении чисел заполнения:

$$|N_{\alpha k}, N\rangle = \delta(N_{\alpha k}, N), \quad (2.82)$$

где $\delta(m, n)$ — символ Кронекера. Возможное число фотонов N в данном случае играет роль аргумента, а число фотонов в моде поля $N_{\alpha k}$ является заданным параметром. Смысл равенства (2.82) очень прост: вектор энергетического состояния электромагнитного поля равен единице, если переменное число фотонов N (аргумент) равен заданному числу фотонов в моде $N_{\alpha k}$, и нулю — в противном случае.

В координатном представлении явный вид вектора энергетического состояния электромагнитного поля дается собственной функцией квантованного гармонического осциллятора (2.57), в которой число n равняется заданному числу фотонов $N_{\alpha k}$ и собственная частота $\omega_0 = \omega_k$.

Формулы (2.77)—(2.82) отвечают одномодовому состоянию электромагнитного поля. В случае многомодового состояния полевой кет-вектор Дирака дается произведением одномодовых векторов состояния

$$|\{N_{\alpha k}\}\rangle = \prod_{\alpha k} |N_{\alpha k}\rangle. \quad (2.83)$$

Фигурные скобки в левой части равенства (2.83) обозначают набор чисел заполнения мод с различными волновыми векторами и поляризациями.



В представлении чисел заполнения (2.82) скалярное произведение одного вектора состояния на другой вектор состояния дается суммой:

$$\langle N_{\alpha k} | N'_{\alpha k} \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \delta(N_{\alpha k}, N) \delta(N'_{\alpha k}, N) = \delta(N_{\alpha k}, N'_{\alpha k}). \quad (2.84)$$

Отсюда, в частности, следует, что совокупность векторов состояния $\{N_{\alpha k}\}$ образуют ортонормированный набор: если $N_{\alpha k} = N'_{\alpha k}$, то скалярное произведение (2.84) равняется единице, в противном случае оно равно нулю. Этот набор также является полным, т. е. с его помощью можно разложить любое состояние электромагнитного поля $|\dots\rangle$ в ряд согласно равенству (здесь мы опускаем индексы у числа фотонов в моде)

$$|\dots\rangle = \sum_N \langle N | \dots \rangle |N\rangle, \quad (2.85)$$

где $\langle N | \dots \rangle$ — скалярное произведение энергетического состояния электромагнитного поля на произвольное состояние $|\dots\rangle$. Квадрат модуля этого скалярного произведения в соответствии с общими квантово-механическими принципами дает вероятность найти N фотонов в состоянии $|\dots\rangle$.

В соответствии с равенством (2.85) любое состояние электромагнитного поля может быть разложено по энергетическим состояниям. Этим и обусловлено широкое применение фотонной картины излучения.

Переход от классического векторного потенциала электромагнитного поля (2.26) к квантовому аналогу можно осуществить в терминах операторов уничтожения $\hat{a}_{\alpha k}$ и рождения $\hat{a}_{\alpha k}^+$ фотонов. Эти операторы определяются равенствами

$$\hat{a}_{\lambda} |N_{\lambda}\rangle = \sqrt{N_{\lambda}} |N_{\lambda} - 1\rangle \quad (2.86)$$

для оператора уничтожения фотона и

$$\hat{a}_{\lambda}^+ |N_{\lambda}\rangle = \sqrt{N_{\lambda} + 1} |N_{\lambda} + 1\rangle \quad (2.87)$$

для оператора рождения фотона. Здесь мы использовали для краткости однобуквенный индекс моды $\lambda = \{\alpha k\}$. Из определений (2.86) и (2.87) следует, что оператор уничтожения уменьшает число фотонов в моде на единицу, а оператор рождения это число увеличивает



на единицу. С помощью равенств (2.86) и (2.87) легко получить коммутационные соотношения между операторами:

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^+] = \delta(\lambda, \lambda'); \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}] = 0; \quad [\hat{a}_\lambda^+, \hat{a}_{\lambda'}^+] = 0, \quad (2.88)$$

где $[\hat{B}, \hat{C}] = \hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}$ — коммутатор операторов \hat{B} и \hat{C} . Для одной моды электромагнитного поля $\lambda = \lambda'$ первая из формул (2.20) переписывается в виде

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (2.89)$$

Здесь индекс моды опущен. Отметим, что единица в правой части равенства (2.89) обозначает единичный оператор, действие которого на вектор состояния поля не меняет последнего (сводится к умножению на единицу).

С помощью введенных операторов рождения и уничтожения фотонов замена классического векторного потенциала на квантовый имеет вид

$$A(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha k} \left[A_{\alpha k}^{(\text{ph})}(\mathbf{r}, t) \hat{a}_{\alpha k} + A_{\alpha k}^{(\text{ph})*}(\mathbf{r}, t) \hat{a}_{\alpha k}^+ \right], \quad (2.90)$$

где $A_{\alpha k}^{(\text{ph})}$ — волновая функция фотона, нормированная на единицу в объеме квантования V ,

$$A_{\alpha k}^{(\text{ph})}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} e_{\alpha k} \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)\}. \quad (2.91)$$

Заметим, что волновая функция фотона (2.91) может быть переписана через корпускулярные характеристики электромагнитного поля — энергию ε_λ и импульс \mathbf{p}_λ фотона — следующим образом:

$$A_\lambda^{(\text{ph})}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 c^2}{V\varepsilon_\lambda}} e_\lambda \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_\lambda \mathbf{r} - \varepsilon_\lambda t)\right]. \quad (2.92)$$

При переходе от выражения (2.91) к равенству (2.92) были использованы формулы для энергии (2.73) и импульса (2.74) фотона через частоту и волновой вектор.

Таким образом, концепция квантованного поля действительно отражает корпускулярно-волновой дуализм материи на математическом уровне: с одной стороны, выражение для векторного потен-



циала (2.90) содержит волновые функции фотонов (2.91), определяющие волновые свойства поля, с другой стороны, в нем присутствуют операторы уничтожения и рождения фотонов, связанные с корпускулярными (квантовыми) свойствами поля.

Через операторы уничтожения и рождения фотонов выражается оператор числа фотонов по формуле

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}. \quad (2.93)$$

С помощью определений (2.86) и (2.87) легко проверить справедливость равенства:

$$\hat{N}_\lambda |N_\lambda\rangle = N_\lambda |N_\lambda\rangle. \quad (2.94)$$

Отсюда ясно, почему оператор (2.93) называется оператором числа фотонов: его действие на вектор состояния электромагнитного поля с заданным числом фотонов сводится к умножению на это число. Через оператор числа фотонов удобно выразить гамильтониан электромагнитного поля. Проще всего это сделать, заменив в формуле (2.70) в левой части равенства энергию на гамильтониан, а правой части число фотонов на оператор числа фотонов:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha k} \left(\hat{N}_{\alpha k} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k = \sum_{\alpha k} \left(\hat{a}_{\alpha k}^+ \hat{a}_{\alpha k} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k, \quad (2.95)$$

Выражение (2.95) наряду с формулой (2.69) является наиболее часто употребляемым представлением гамильтониана электромагнитного поля.

Как известно, частицы вещества (электрон, протон и др.) обладают, вообще говоря, орбитальным l и спиновым s моментом количества движения. Первый из них отвечает пространственной зависимости волновой функции, а второй определяет закон преобразования компонент волновой функции при переходе из одной системы отсчета в другую.

Наличие отличного от нуля спина, следовательно, предполагает многокомпонентность волновой функции. Если компоненты две (как у электрона), то говорят о спине, равном $1/2$. При этом волновая функция является спинором первого ранга. Если имеется три компоненты, то волновая функция является трехмерным вектором, хорошо известным из курса элементарной математики. Спинор первого ранга является простейшим объектом, с помощью которого



конструируются спиноры высших рангов, так же как из компонент вектора (тензора первого ранга) составляются компоненты тензоров более высоких рангов. Можно показать, что трехмерный вектор по своим трансформационным свойствам эквивалентен симметричному спинору второго ранга.

Поскольку спиновые и орбитальные степени свободы могут быть связанными друг с другом (например, посредством спин-орбитального взаимодействия), то в этом случае сохраняющейся во времени величиной является полный момент $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$.

Волновая функция фотона (2.91) носит векторный характер, обусловленный вектором поляризации излучения $\mathbf{e}_{\alpha k}$. Поэтому фотону можно было бы приписать спин, равный единице, если бы вектор поляризации не был бы связан с волновым вектором, условием поперечности $\mathbf{k} \mathbf{e}_{\alpha k} = 0$. В результате невозможно разделить спин и орбитальный момент как две независимые величины и можно говорить лишь о полном моменте фотона $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. Тем не менее часто вводятся спин и орбитальный момент фотона как вспомогательные понятия.

Условие поперечности свободного электромагнитного поля приводит к тому, что для задания произвольного вектора поляризации фотона \mathbf{e} достаточно двух чисел e_1 и e_2 :

$$\mathbf{e} = e_1 \mathbf{e}^{(1)} + e_2 \mathbf{e}^{(2)}, \quad (2.96)$$

где $\mathbf{e}^{(1)}$ и $\mathbf{e}^{(2)}$ — два взаимно ортогональных действительных вектора единичной длины, лежащие в плоскости, ортогональной волновому вектору \mathbf{k} . Числа e_1 и e_2 , вообще говоря, комплексные, квадраты их модулей определяют вероятность фотона иметь ту или иную линейную поляризацию, задаваемую базисными векторами $\mathbf{e}^{(1)}$ и $\mathbf{e}^{(2)}$.

Вместо действительных векторов, отвечающих линейной поляризации, можно ввести комплексные базисные векторы $\mathbf{e}^{(+)}$ и $\mathbf{e}^{(-)}$, которые выражаются через действительный поляризационный базис по формулам:

$$\mathbf{e}^{(+)} = -\frac{i}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}^{(1)} + i \mathbf{e}^{(2)}); \quad \mathbf{e}^{(-)} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}^{(1)} - i \mathbf{e}^{(2)}). \quad (2.97)$$

Базисные векторы (2.97) отвечают правой и левой циркулярной поляризации фотона.



В случае эллиптической поляризации комплексный вектор поляризации излучения может быть представлен в виде

$$\mathbf{e} = \frac{\boldsymbol{\varepsilon} + i\gamma[\mathbf{k}\boldsymbol{\varepsilon}]}{\sqrt{1 + \gamma^2}}, \quad (2.98)$$

где γ — параметр эллиптичности; $\boldsymbol{\varepsilon}$ — единичный вектор, направленный вдоль главной оси поляризационного эллипса. Вектор (2.98) удовлетворяет условию нормировки $\mathbf{e}\mathbf{e}^* = 1$. Если параметр эллиптичности $\gamma = \pm 1$, реализуется случай циркулярной поляризации, если $\gamma = 0$ — излучение линейно поляризовано.

Проекция момента фотона на направление его движения называется *спиральностью*. Поскольку имеет место условие поперечности $\mathbf{k}\mathbf{e}_{ak} = 0$, то спиральность фотона может принимать два значения $+1$ (для правой круговой поляризации) и -1 (для левой круговой поляризации). Нулевая спиральность невозможна, поскольку вектор поляризации фотона всегда перпендикулярен его волновому вектору.

Таким образом, состояния фотона с заданным импульсом и энергией всегда являются дважды вырожденными по его поляризации (или спиральности). Отсутствие трехкратного вырождения, характерного для векторных частиц с ненулевой массой, связано с тем, что у фотона нулевая масса и для него не существует системы покоя: в любой системе отсчета фотон движется со скоростью света.

Таким образом, любое состояние электромагнитного поля можно представить как совокупность единых неделимых квантов — фотонов — энергия, импульс и закон дисперсии которых даются формулами (2.72)—(2.75), а энергия и импульс поля описываются выражениями (2.70), (2.72). Волновая функция фотона (2.91) является векторной величиной, удовлетворяющей условию поперечности. Фотонное состояние с заданным волновым вектором дважды вырождено по поляризации.

2.5. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

В классической электродинамике электромагнитное излучение описывается с помощью напряженностей электрического и магнитного полей. Поскольку среднее значение напряженности поля в квантовой теории пропорционально среднему значению оператор-



ров уничтожения и рождения фотонов [см. (2.90)], то естественно предположить, что состояние, наиболее близкое к классическому, должно являться собственным для этих операторов. Иными словами, оно должно удовлетворять равенствам [6]:

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle; \quad (2.99)$$

$$\hat{a}^+|z\rangle = z^*|z\rangle, \quad (2.100)$$

где $z = z' + iz'' = |z| \exp(i \arg z)$ — комплексное число. Состояния электромагнитного поля, удовлетворяющие уравнениям (2.99) и (2.100), называются *когерентными*, а число z является *параметром когерентного состояния*.

С помощью определения (2.99) и (2.100) и равенств (2.63), (2.90) можно получить среднее значение напряженности электрического поля в когерентном состоянии:

$$\begin{aligned} \langle z | \hat{E}(\mathbf{r}, t) | z \rangle &= \\ &= i \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum_{\alpha k} \sqrt{\omega_k} [e_{\alpha k} e^{i(kr - \omega t)} z_{\alpha k} - e_{\alpha k}^* e^{-i(kr - \omega t)} z_{\alpha k}^*]. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Пусть для простоты электромагнитное поле является линейно поляризованным, тогда $e_{\alpha k} = e_{\alpha k}^*$, и формулу (2.101) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle_z &\equiv \langle z | \hat{E}(\mathbf{r}, t) | z \rangle = \\ &= 2 \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum_{\alpha k} \sqrt{\omega_k} e_{\alpha k} |z_{\alpha k}| \sin(\omega t - \mathbf{kr} - \arg z_{\alpha k}). \end{aligned} \quad (2.102)$$

Данное равенство позволяет дать физическую интерпретацию параметра когерентного состояния z . Модуль этого параметра связан с амплитудой напряженности электрического поля в соответствующей моде:

$$E_{0\alpha k} = 2 \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}} |z_{\alpha k}|, \quad (2.103)$$

а аргумент определяет сдвиг фаз в электромагнитной волне

$$\Delta\varphi = \arg z_{\alpha k}. \quad (2.104)$$



Из формул (2.101)–(2.104) следует важный вывод о том, что в когерентном состоянии *одновременно* определены амплитуда и фаза электромагнитного поля.

Когерентные состояния обладают непрерывным комплексным спектром, их собственные векторы $|z\rangle$ образуют полный набор, но не ортогональны друг к другу. Можно показать, что модуль их скалярного произведения $\langle z_1 | z_2 \rangle$ равен

$$|\langle z_1 | z_2 \rangle| = \exp\left(-\frac{|z_1 - z_2|^2}{2}\right). \quad (2.105)$$

Этим когерентные состояния существенно отличаются от энергетических, которые имеют дискретный спектр и взаимно ортогональны.

Подействуем оператором числа фотонов $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ на когерентное состояние $|z\rangle$. Результат легко получить с помощью определений (2.99) и (2.100):

$$\hat{N} |z\rangle = |z|^2 |z\rangle. \quad (2.106)$$

Тогда для среднего числа фотонов в когерентном состоянии имеем

$$\langle \hat{N} \rangle_z = \langle z | \hat{N} | z \rangle = |z|^2. \quad (2.107)$$

Равенство (2.107) указывает на еще одну физическую интерпретацию параметра когерентного состояния: квадрат его модуля равен среднему числу фотонов в когерентном состоянии.

Из уравнения (2.106) вытекает, что когерентное состояние $|z\rangle$ является собственным для оператора числа фотонов \hat{N} с собственным значением $|z|^2$, которое, вообще говоря, не является целым числом. Уже из этого видно, что число фотонов, являющееся натуральной величиной, в когерентном состоянии не имеет определенного значения: т. е. производя измерения, мы будем с некоторой ненулевой вероятностью получать различные числа фотонов в заданном когерентном состоянии. Чтобы определить эту вероятность, разложим когерентное состояние по энергетическим состояниям:

$$|z\rangle = \sum_N \langle N | z \rangle | N \rangle. \quad (2.108)$$



В соответствии с основными постулатами квантовой механики вероятность обнаружения N фотонов в состоянии $|z\rangle$ равна

$$P_N(z) = |\langle N|z\rangle|^2. \quad (2.109)$$

Таким образом, задача состоит в определении коэффициентов разложения $\langle N|z\rangle$, фигурирующих в равенстве (2.108). Для этого выразим вектор состояния с N фотонами ($|N\rangle$) через вакуумное состояние электромагнитного поля $|0\rangle$. С помощью определения оператора рождения фотона (2.87) можно получить

$$|N\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^N}{\sqrt{N!}}|0\rangle. \quad (2.110)$$

Соотношение (2.110) связывает кет-векторы (угловая скобка вправо). Для вычисления коэффициента $\langle N|z\rangle$ удобно перейти в (2.110) к бра-векторам (угловая скобка влево). Математически этот переход соответствует замене операторов $\hat{a}^+ \rightarrow \hat{a}$. В результате для коэффициентов разложения (2.108) находим

$$\langle N|z\rangle = \langle 0|\frac{(\hat{a})^N}{\sqrt{N!}}|z\rangle = \frac{z^N}{\sqrt{N!}}\langle 0|z\rangle. \quad (2.111)$$

В полученном выражении остается неопределенным коэффициент $\langle 0|z\rangle$, модуль которого может быть определен из условия нормировки:

$$\sum_N |\langle N|z\rangle|^2 = \sum_N P_N(z) = 1, \quad (2.112)$$

которое означает, что полная вероятность найти *любое* число фотонов в когерентном состоянии равняется единице.

Подставляя (2.111) в формулу (2.112), находим для искомой величины выражение

$$\langle 0|z\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right). \quad (2.113)$$

При записи правой части равенства (2.113) опущен несущественный для нашего изложения фазовый множитель.

Итак, разложение (2.108) имеет следующий вид:

$$|z\rangle = \sum_N \frac{z^N}{\sqrt{N!}} \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) |N\rangle. \quad (2.114)$$



Отсюда, в частности, следует выражение для вероятности $P_N(z)$:

$$P_N(z) = \frac{(|z|^2)^N}{N!} e^{-|z|^2}. \quad (2.115)$$

Таким образом, вероятность обнаружения заданного числа фотонов в когерентном состоянии дается распределением Пуассона (2.115) (рис. 2.4). Оно может быть переписано через среднее число фотонов, задаваемое формулой (2.107), в виде

$$P_N(z) = \frac{\langle N \rangle_z^N}{N!} \exp(-\langle N \rangle_z). \quad (2.116)$$

Как известно, дисперсия случайной величины, описываемой распределением Пуассона, равняется среднему значению этой величины, так что в нашем случае $DN_z = \langle N \rangle_z = |z|^2$.

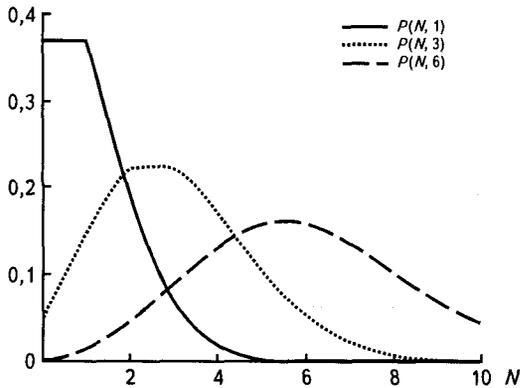


Рис. 2.4. Распределение Пуассона для различных средних чисел фотонов $\langle N \rangle_z$: сплошная кривая — $\langle N \rangle_z = 1$; пунктирная — $\langle N \rangle_z = 3$; штриховая — $\langle N \rangle_z = 6$

Из рис. 2.4 видно, что максимум распределения Пуассона приходится на величину, равную среднему числу фотонов в когерентном состоянии, причем ширина распределения возрастает с ростом $\langle N \rangle_z$.

Рассмотрим теперь временную эволюцию когерентного состояния свободного электромагнитного поля. Воспользуемся для этого равенством (2.79), подставив в его правую часть полученное разло-

жение когерентного состояния по энергетическим состояниям (2.114). Тогда с учетом равенства (2.77) находим

$$\begin{aligned} |z, t\rangle &= \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |z\rangle = \\ &= \sum_N \frac{z^N e^{-iN\omega t}}{\sqrt{N!}} \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) |N\rangle = |ze^{i\omega t}\rangle \equiv |z(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.117)$$

При записи (2.117) в последнем равенстве был отброшен фазовый множитель $\exp\{-i\omega t/2\}$, который не изменяет значения наблюдаемых величин.

Таким образом, свободная эволюция электромагнитного поля во времени не изменяет характера когерентного состояния, а приводит лишь к временной зависимости его параметра $z(t) = ze^{i\omega t}$. Это значит, что с течением времени продолжают выполняться равенства (2.99) и (2.100) с заменой $z \rightarrow z(t)$.

Для того чтобы определить явный вид когерентных состояний в координатном представлении, т. е. когда аргументом волновой функции является обобщенная координата, выпишем соотношения, связывающие операторы уничтожения и рождения фотонов и операторы канонических переменных (обобщенных координат и импульсов):

$$\hat{a} = \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}; \quad (2.118)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}. \quad (2.119)$$

Здесь введены безразмерные канонические переменные согласно равенствам

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \hat{q}; \quad (2.120)$$

$$\hat{p} = \sqrt{\hbar\omega} \hat{p}. \quad (2.121)$$

В координатном представлении действие оператора обобщенной координаты на вектор состояния сводится к умножению на нее,



а действие оператора обобщенного импульса дается дифференцированием по обобщенной координате:

$$\hat{q} = q; \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}. \quad (2.122)$$

Заметим, что из определений (2.122) следует закон коммутации операторов обобщенной координаты и обобщенного импульса $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, что легко проверить непосредственно.

С учетом (2.118) и (2.122) получаем явный вид оператора уничтожения фотонов в координатном представлении

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\bar{q} + \frac{d}{d\bar{q}} \right). \quad (2.123)$$

Используя равенство (2.123), уравнение (2.99), являющееся определением когерентного состояния, можно переписать в координатном представлении

$$\left(\bar{q} + \frac{d}{d\bar{q}} \right) \langle \bar{q} | z \rangle = \sqrt{2} z \langle \bar{q} | z \rangle. \quad (2.124)$$

Запись $\langle \bar{q} | z \rangle$ означает, что аргументом вектора когерентного состояния является обобщенная координата.

Решение уравнения (2.124) дается формулой

$$\langle \bar{q} | z \rangle = \frac{C_q(z)}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\bar{q} - \langle \bar{q} \rangle_z)^2 \right], \quad (2.125)$$

где $|C_q(z)| = 1$ и $\langle \bar{q} \rangle_z$ — среднее значение безразмерной обобщенной координаты в когерентном состоянии ($z' = \text{Re } z$),

$$\langle \bar{q} \rangle_z \equiv \langle z | \hat{q} | z \rangle = \sqrt{2} z'. \quad (2.126)$$

Для вероятности найти значение обобщенной координаты, равное \bar{q} , в когерентном состоянии $|z\rangle$ из (2.125) получаем

$$P_{\bar{q}}(z) \equiv |\langle \bar{q} | z \rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp \left[-(\bar{q} - \langle \bar{q} \rangle_z)^2 \right]. \quad (2.127)$$



Аналогично для распределения обобщенного импульса в когерентном состоянии можно получить

$$P_{\tilde{p}}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-(\tilde{p} - \langle \tilde{p} \rangle_z)^2\right], \quad (2.128)$$

где $\langle \tilde{p} \rangle_z$ — среднее значение обобщенного импульса в когерентном состоянии ($z'' = \text{Im } z$),

$$\langle \tilde{p} \rangle_z \equiv \langle z | \hat{p} | z \rangle = \sqrt{2} z''. \quad (2.129)$$

Формула (2.128) получается с помощью решения уравнения (2.99), в котором оператор уничтожения фотонов выражен через операторы канонических переменных (2.118), для которых использовано импульсное представление. В импульсном представлении вместо (2.122) имеем следующий явный вид канонических операторов:

$$\hat{q} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}; \quad \hat{p} = p. \quad (2.130)$$

В результате получается уравнение, совпадающее с (2.124) с точностью до замены $q \rightarrow p$. Таким образом, распределение обобщенной координаты и обобщенного импульса в когерентном состоянии дается равенствами (2.127) и (2.128). Сравним эти распределения с распределением Гаусса:

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} D_x} \exp\left\{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2D_x^2}\right\}, \quad (2.131)$$

где $\langle x \rangle$ — математическое ожидание (среднее значение) переменной x ; D_x^2 — дисперсия случайной величины, характеризующая ее разброс около среднего значения,

$$D_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.$$

Сравнивая (2.127) и (2.128) с формулой (2.131), приходим к выводу, что в когерентном состоянии электромагнитного поля вероятность обнаружить заданное значение обобщенной координаты и импульса описывается распределением Гаусса. Причем это распределение для безразмерных величин обладает дисперсией $1/2$, т. е.

$$\langle \Delta \tilde{q} \rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad \langle \Delta \tilde{p} \rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Отсюда следует, что произведение квантово-механических неопределенностей обобщенной координаты и обобщенного импульса в когерентном состоянии поля $|z\rangle$ равно

$$\{\Delta q \Delta p\}_z = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.132)$$

Соотношение неопределенностей Гейзенберга для обобщенной координаты и обобщенного импульса в общем случае имеет вид:

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.133)$$

Оно говорит о том, что канонические переменные не могут быть определены одновременно сколь угодно точно: чем точнее измеряется одна из них, тем больше разброс в другой. Мера взаимной неопределенности дается постоянной Планка. В классическом пределе, когда постоянная Планка равна нулю, ограничение (2.133) снимается.

Из сравнения (2.132) и (2.133) следует, что в когерентном состоянии электромагнитного поля соотношение неопределенностей Гейзенберга достигает своей *наименьшей* величины. Это и есть характеристическое свойство когерентного состояния. Из него, в частности, следует, что когерентное состояние поля наиболее близко к классическому электромагнитному полю, для которого все квантово-механические неопределенности по определению равны нулю. Отметим, что лазерное электромагнитное поле лучше всего аппроксимируется когерентным состоянием.

Рассмотрим временную эволюцию распределения обобщенной координаты и обобщенного импульса в когерентном состоянии. Исходим из соотношения (2.117), которое говорит о том, что временная зависимость когерентного состояния определяется временной зависимостью его параметра $z(t) = z e^{i\omega t}$. Реальная часть этого параметра $z(t)$ определяет согласно (2.126) среднее значение обобщенной координаты, а мнимая — среднее значение обобщенного импульса (2.129). Разброс канонических переменных около своих средних значений от времени не зависит и равен $1/\sqrt{2}$.

Определим теперь энергетические состояния поля в координатном представлении, т. е. явный вид векторов $|\bar{q}|N\rangle$. Для этого удобно начать с определения собственного вектора вакуумного состоя-

ния электромагнитного поля $\langle \bar{q} | 0 \rangle$. Воспользуемся уравнением Шредингера для электромагнитного поля, которое в случае одной моды поля имеет вид

$$\hat{H}(\bar{q}) \langle \bar{q} | N \rangle = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \langle \bar{q} | N \rangle, \quad (2.134)$$

где $\hat{H}(\bar{q})$ — гамильтониан поля в координатном представлении, явный вид которого следует из формул (2.120)—(2.122),

$$\hat{H}(\bar{q}) = \frac{\hbar \omega}{2} \left(\bar{q}^2 - \frac{d^2}{d\bar{q}^2} \right). \quad (2.135)$$

Из равенств (2.134) и (2.135) вытекает уравнение на собственный вектор энергетического состояния поля $\langle \bar{q} | N \rangle$:

$$\left(\bar{q}^2 - 2N - 1 - \frac{d^2}{d\bar{q}^2} \right) \langle \bar{q} | N \rangle = 0. \quad (2.136)$$

Легко проверить, что для $N = 0$ уравнение (2.136) имеет следующее решение:

$$\langle \bar{q} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left(-\frac{\bar{q}^2}{2} \right). \quad (2.137)$$

Это и есть вакуумное состояние электромагнитного поля в координатном представлении.

Множитель перед экспонентой в правой части (2.137) определяется из условия нормировки собственного вектора. Обратим внимание на то, что вакуумное энергетическое состояние (2.137) совпадает с когерентным состоянием поля (2.125), если параметр когерентного состояния равен нулю: $z = 0$. Действительно, тогда среднее значение обобщенной координаты тоже равно нулю:

$$\langle \bar{q} \rangle_z \equiv \sqrt{2} z' = 0,$$

и правая часть равенства (2.125) совпадает с правой частью (2.137), если положить $C_q(z) = 1$.

Зная вакуумный вектор (2.137), можно получить все остальные векторы энергетических состояний поля, если воспользоваться ра-

венством (2.110) и выражением для оператора рождения фотона в координатном представлении:

$$\hat{a}^+ = \frac{\tilde{q} - d/d\tilde{q}}{\sqrt{2}}.$$

В результате имеем для энергетического состояния поля в координатном представлении равенство

$$\langle \tilde{q} | N \rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^N} N!} \left(\tilde{q} - \frac{d}{d\tilde{q}} \right)^N e^{-\tilde{q}^2/2}, \quad (2.138)$$

где символ $(\tilde{q} - d/d\tilde{q})^N$ обозначает оператор $(\tilde{q} - d/d\tilde{q})$, примененный N раз к стоящей справа от него функции. Можно показать, что функциональная зависимость энергетических состояний поля в координатном представлении (2.138) совпадает с таковой для волновых функций гармонического осциллятора (2.57), если в последней массу положить равной единице.

Интересно представить квантовые состояния электромагнитного поля на фазовой плоскости (\tilde{q}, \tilde{p}) . На этой плоскости энергетическим состояниям будут соответствовать окружности с центром в начале координат и радиусом, равным $\sqrt{2N+1}$. В соответствии с формулами (2.127) и (2.128) когерентные состояния поля представляются кругами с радиусом $1/\sqrt{2}$. Центры этих кругов располагаются на окружности с центром в начале координат и радиусом, равным $\sqrt{2|z|^2+1}$.

Существуют еще *фазовые* состояния электромагнитного поля, в которых фиксирована фаза поля и полностью не определена его энергия. Эти состояния изобразятся лучами, исходящими из начала координат. Заметим, что в энергетических состояниях поля, наоборот, фиксирована энергия и полностью не определена фаза. Это является отражением того факта, что фаза и энергия поля (так же как координата и импульс) являются сопряженными параметрами, связанными соотношением неопределенности типа (2.133). Наконец, вакуумное состояние поля будет представлено на фазовой плоскости кругом радиусом $1/\sqrt{2}$ с центром в начале координат. Как отмечалось выше, это последнее состояние одновременно является энергетическим с числом фотонов, равным нулю, и когерентным с нулевым параметром z .

В последнее время обсуждается возможность реализации так называемых *сжатых* состояний поля. В таких состояниях квантовые флуктуации обобщенной координаты или обобщенного импульса могут быть меньше своих вакуумных значений (равных $1/\sqrt{2}$ для безразмерных величин \tilde{q} и \tilde{p}). Рассмотрение этих вопросов, однако, выходит за рамки настоящей книги.

Таким образом, когерентные состояния, для которых минимизируется соотношение неопределенностей Гейзенберга (2.132) и (2.133), являются квантовым прообразом состояний классического электромагнитного поля. Усреднение по когерентным состояниям операторных уравнений Максвелла в первом приближении приводит к уравнениям, в которых фигурируют классические напряженности электрического и магнитного полей.

Литература

1. Планк М. О законе распределения энергии в нормальном спектре. Избранные труды. М.: Наука, 1975, с. 258—269.
2. Эйнштейн А. Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света. Собрание научных трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966, с. 92—108.
3. Сивухин Д.В. Оптика. М.: Физматлит, 2005. 792 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
5. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. М.: Физматлит, 2001. 720 с.
6. Клышко Д.Н. Физические основы квантовой электроники. М.: Наука, 1986. 294 с.

3.1. ФОТОЭФФЕКТ

Фотоэффект представляет собой испускание электронов веществом под действием электромагнитного излучения. Это явление при освещении цинковой мишени ультрафиолетовым излучением впервые наблюдалось Г. Герцем в 1887 г. Ранее, в 1839 г. А. Беккерель, исследовавший электрические явления при освещении тел, обнаружил фотоэффект в электролите, а в 1873 г. В. Смит зарегистрировал фотопроводимость селена.

Данное выше определение относится к *внешнему фотоэффекту*, который и открыл Г. Герц. Испускаемые поверхностью тел под действием света электроны называются фотоэлектронами. Помимо внешнего существует также *внутренний фотоэффект*, проявляющийся в увеличении электрической проводимости вещества при освещении. Именно это явление наблюдалось В. Смитом. К фотоэффекту относят также *фотовольтаический эффект*, проявляющийся в возникновении электродвижущей силы под действием излучения. Наконец фотоионизация атомов называется *атомным фотоэффектом*.

Схематическое представление внешнего фотоэффекта показано на рис. 3.1.

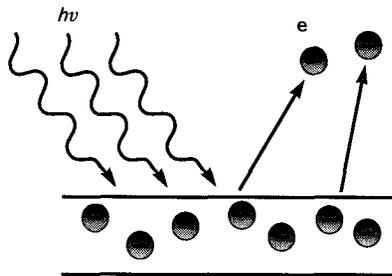


Рис. 3.1. Внешний фотоэффект

Законы внешнего фотоэффекта детально изучались российским физиком А. Столетовым в 1888—1890 гг. сразу же после открытия этого явления Г. Герцем. Принципиальная схема установки, с помощью которой можно исследовать внешний фотоэффект, приведена на рис. 3.2.

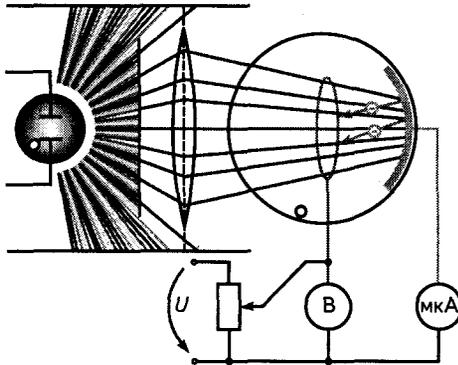


Рис. 3.2. Схема установки по наблюдению внешнего фотоэффекта (автор рисунка Stefan-Xp)

Законы внешнего фотоэффекта можно сформулировать следующим образом:

1. Сила фототока пропорциональна интенсивности излучения, вызывающего фотоэффект.
2. Энергия фотоэлектронов определяется частотой света и не зависит от интенсивности излучения.
3. Для каждого вещества существует своя максимальная длина волны излучения (красная граница), выше которой фотоэффект не наблюдается.

Важно подчеркнуть, что второй и третий законы фотоэффекта невозможно объяснить, находясь на позициях классической физики. Действительно, в соответствии с электронной теорией Лоренца электроны вещества под действием электрического поля световой волны осциллируют с амплитудой и скоростью, пропорциональной амплитуде напряженности электрического поля. Таким образом, энергия фотоэлектронов должна быть пропорциональна интенсивности излучения, что противоречит второму закону фотоэффекта.



Поскольку (в рамках классического рассмотрения) энергия, сообщаемая электронам излучением, пропорциональна интенсивности, то для любой длины волны излучения найдется интенсивность, достаточная для преодоления электронами вещества работы выхода, что противоречит третьему закону фотоэффекта. Напомним, что работа выхода равняется минимальной энергии, которую необходимо затратить для удаления электрона из вещества в вакуум (в состоянии с равной нулю кинетической энергией).

Значения работы выхода в электрон-вольтах ($1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$) для ряда металлов приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1. Работа выхода некоторых металлов

Металл	Al	Pt	Fe	Cu	Zn	Ag	Cs	Na	W
Работа выхода, эВ	4,25	5,32	4,31	4,4	4,24	4,3	1,89	2,3	4,54

Из табл. 3.1, в частности, следует, что минимальной работой выхода обладают щелочные металлы, а максимальной — металлы подгруппы платины.

Для преодоления противоречия между экспериментальными данными по фотоэффекту и классической теорией необходимо перейти к новой картине электромагнитного поля, что и было сделано А. Эйнштейном в его работе «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света», вышедшей в свет в 1905 г. [1]. В этой работе Эйнштейн на основании квантовых представлений, введенных в физику М. Планком, изложил новый мировоззренческий подход к описанию электромагнитного поля, который позволил, в частности, теоретически объяснить законы внешнего фотоэффекта, сформулированные выше. Ядром нового мировоззрения на природу излучения является представление об электромагнитном поле как об идеальном газе частиц — квантов излучения, которые позднее, в 1926 г., американским физиком и химиком Г.Н. Льюисом были названы фотонами.

Таким образом, квантование энергии вещества, введенное М. Планком для объяснения законов теплового излучения, было дополнено Эйнштейном квантованием электромагнитного поля. Это квантование носило качественный характер и опиралось на формулу Вина

(2.10) для спектра теплового излучения ρ , которая в современных обозначениях имеет вид:

$$\rho_T^{(w)}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right), \quad (3.1)$$

где ω — круговая частота; c — скорость света; T — температура. Здесь и далее температура выражена в энергетических единицах, т. е. константа Больцмана положена равной единице. Как упоминалось во гл. 2, формула Вина является высокочастотным пределом формулы Планка, когда энергия фотона велика, и выполняется неравенство $\hbar\omega \gg T$. Данное неравенство говорит о том, что в пределе Вина плотность энергии теплового излучения мала [поскольку отношение $-\hbar\omega/T$ входит в показатель экспоненты (3.1)]. В этом пределе квантовые свойства излучения должны проявляться наиболее сильно, поэтому не случайно, что Эйнштейн воспользовался именно выражением (3.1). Он предварительно показал, что термодинамическая формула, связывающая энтропию S , температуру и энергию E ($dS = dE/T$), в случае теплового излучения может быть переписана в виде

$$\frac{\partial\varphi}{\partial\rho} = \frac{1}{T}, \quad (3.2)$$

где функция φ определяется равенством

$$S = V \int_0^\infty \varphi(\rho, \omega) d\omega, \quad (3.3)$$

т. е. является пространственно-спектральной плотностью энтропии теплового излучения, которое, как известно, однородно. Из формул (3.1) и (3.2) вытекает соотношение:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial\rho} = -\frac{1}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{\pi^2c^3\rho}{\hbar\omega^3}\right), \quad (3.4)$$

интегрируя которое можно получить

$$\varphi = -\frac{\rho}{\hbar\omega} \left\{ \ln\left(\frac{\pi^2c^3\rho}{\hbar\omega^3}\right) - 1 \right\}. \quad (3.5)$$

Энергия теплового излучения, частоты которого лежат в интервале от ω до $\omega + \delta\omega$, находящегося в объеме V , равна $\delta E = V\rho\delta\omega$. Энтропия этого излучения в соответствии с определением (3.3) равна $\delta S = V\varphi\delta\omega$. Подставляя в последнюю формулу выражение (3.5), находим:

$$\delta S(V) = \frac{\delta E}{\hbar\omega} \left\{ \ln \left(V \frac{\pi^2 c^3 \delta\omega}{\hbar\omega^3 \delta E} \right) - 1 \right\}. \quad (3.6)$$

Здесь выделена зависимость энтропии от объема. Интересуясь вслед за Эйнштейном только этой зависимостью, из равенства (3.6) окончательно получаем

$$\delta S(V) - \delta S(V_0) = \frac{\delta E}{\hbar\omega} \ln \left\{ \frac{V}{V_0} \right\}. \quad (3.7)$$

Здесь приведен оригинальный вывод Эйнштейном формулы, описывающей зависимость энтропии теплового излучения от занимаемого объема. Выпишем теперь выражение для энтропии N атомов идеального газа как функции объема:

$$S(V) - S(V_0) = N \ln \left\{ \frac{V}{V_0} \right\}. \quad (3.8)$$

Сравнивая формулы (3.8) и (3.7), приходим к выводу, что, по крайней мере, в смысле зависимости энтропии от объема тепловое излучение ведет себя как идеальный газ квантов излучения (фотонов). Из данного сравнения также следует, что энергия одного фотона равна:

$$\varepsilon = \hbar\omega. \quad (3.9)$$

Не путать уравнение (3.9) для энергии фотона с аналогичным равенством, впервые использованным М. Планком для квантования энергии *осциллятора вещества*. Отметим, что в своей теории теплового излучения Планк предполагал электромагнитное поле сугубо классическим объектом без всякого квантования его энергии.

Вышеприведенная аналогия с идеальным газом говорит также о том, что фотоны, составляющие свет, не взаимодействуют друг с другом. Этот факт отвечает линейности уравнений Максвелла и вытекающему из нее принципу суперпозиции электромагнитного поля.

Строго говоря, отсутствие взаимодействия между фотонами не является точным утверждением. Дело в том, что согласно квантовой электродинамике взаимодействие между фотонами все же возможно. Оно возникает в результате эффекта поляризации вакуума, когда один из сталкивающихся фотонов порождает электрон-позитронную пару, а другой фотон на ней рассеивается. Величина этого эффекта крайне мала, так что с хорошей точностью фотон-фотонным взаимодействием можно пренебречь.

В цитируемой работе Эйнштейн задает следующий вопрос: если электромагнитное излучение ведет себя в пространстве как совокупность единых неделимых частиц с энергией (3.9), то не будет ли проявляться это свойство при взаимодействии излучения с веществом? При положительном ответе на этот вопрос, который и был дан Эйнштейном, фотоэффект можно описать как поглощение фотонов электронами в режиме: один электрон поглощает один фотон. Если после поглощения фотона у электрона оказывается достаточно энергии для преодоления работы выхода, он покидает вещество, и возникает фототок. Закон сохранения энергии в этом процессе может быть записан в виде следующего уравнения:

$$\hbar\omega = A + \frac{mv_{\max}^2}{2}, \quad (3.10)$$

где A — работа выхода из данного вещества; m , v_{\max} — масса и максимальная скорость фотоэлектрона. Равенство (3.10) и есть уравнение Эйнштейна для фотоэффекта, с помощью которого легко объяснить второй и третий законы фотоэффекта, приведенные выше. Действительно, из (3.10) непосредственно следует, что кинетическая энергия фотоэлектрона линейно возрастает с ростом частоты излучения. Отметим, что в правой части равенства (3.10) фигурирует максимальная скорость, поскольку электроны могут вырываться с более глубоких уровней энергии в веществе, чем те, для которых определена работа выхода. Эти электроны, естественно, будут иметь меньшую кинетическую энергию и меньшую (по модулю) скорость.

Из уравнения фотоэффекта (3.10) вытекает, что, если частота излучения достаточно мала

$$\omega < \omega_{\min} = \frac{A}{\hbar},$$

то максимальная кинетическая энергия принимает отрицательное значение, т. е. фототок отсутствует. Этой минимальной частоте соответствует максимально возможная длина волны излучения

$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi c}{\omega_{\min}},$$

при которой фотоэффект для данного вещества еще возможен (красная граница фотоэффекта). Длина волны красной границы равна

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{A}.$$

Поскольку работа выхода обычно измеряется в электрон-вольтах, для оценки максимальной длины волны фотоэффекта удобно использовать следующую формулу:

$$\lambda_{\max} [\mu\text{m}] \cong \frac{1,24}{A [\text{эВ}]} \quad (3.11)$$

Отсюда и из данных табл. 3.1 следует, что длина волны красной границы для цезия равняется 656 нм, а для платины — 233 нм, т. е. в первом случае достаточно красного излучения для возбуждения фототока, а во втором случае необходимо ультрафиолетовое излучение. Равенство (3.11) является частным случаем более общего соотношения, которое связывает длину волны электромагнитного излучения в микронах с энергией соответствующего фотона в электрон-вольтах.

Первый закон фотоэффекта также просто объясняется в рамках фотонной картины электромагнитного поля: чем больше интенсивность излучения, тем больше фотонов и, соответственно, больше актов поглощения фотонов электронами, а значит выше фототок.

Закон сохранения энергии при взаимодействии излучения с веществом в виде уравнения (3.10) может быть использован и для описания родственных фотоэффекту светоиндуцированных процессов, таких, как, например, катодная люминесценция, или *катодолюминесценция*. Катодная люминесценция представляет собой свечение вещества при его облучении электронами и является процессом обратным внешнему фотоэффекту. Это явление широко используется в различных электронных приборах: электронно-лучевых трубках, электронно-оптических преобразователях, фотоэлектронных умно-

жителях и др., а также при исследовании люминесцентных свойств вещества. Для последней цели в настоящее время все чаще в качестве источника электронов используется сканирующий электронный микроскоп, который позволяет изучать локальные свойства мишени, точно позиционируя электронный пучок малого диаметра в нужной точке.

В случае катодолюминесценции уравнение (3.10) для заданной кинетической энергии возбуждающих электронов будет определять максимально возможную частоту люминесценции (или минимально возможную длину волны), как это отмечалось в цитируемой работе Эйнштейна. Между обсуждаемыми процессами и их описанием с помощью уравнения (3.10) имеется и существенное различие. Дело в том, что в случае фотоэффекта под действием нелазерных источников, когда интенсивность излучения невелика, электрон среды, как правило, поглощает *один* фотон. В противном случае говорят о нелинейном фотоэффекте, для которого вместо (3.10) нужно писать

$$n\hbar\omega = A + \frac{mv_{\max}^2}{2}, \quad (3.12)$$

где n — число поглощаемых фотонов одним фотоэлектроном. В случае катодной люминесценции, вызываемой электронами достаточно высокой энергии, один электрон может излучить и несколько фотонов в процессе своего рассеяния в веществе. Характерная энергия электронов в сканирующем электронном микроскопе, например, составляет несколько десятков килоэлектронвольт. Поэтому формула (3.10) при описании катодолюминесценции должна быть переписана в виде нестрогого неравенства:

$$\hbar\omega \leq A + T,$$

где T — кинетическая энергия электрона.

При воздействии на твердое тело лазерного излучения высокой интенсивности оказывается возможным поглощение выбиваемым электроном вещества нескольких фотонов одновременно или, как говорят, в ходе единого элементарного акта. В этом случае число n в левой части равенства (3.12) больше единицы, а фототок пропорционален интенсивности излучения в n -й степени: $i_{\text{ph}} = \eta_n I^n$ (η_n — вероятность n -квантового фотоэффекта), т. е. является нелинейной функцией интенсивности излучения. Данный процесс называется



нелинейным фотоэффектом. Зависимость силы фототока от интенсивности излучения, вызывающего линейный и нелинейный фотоэффект, в случае выполнения условия $\hbar\omega > A$ представлена на рис. 3.3.

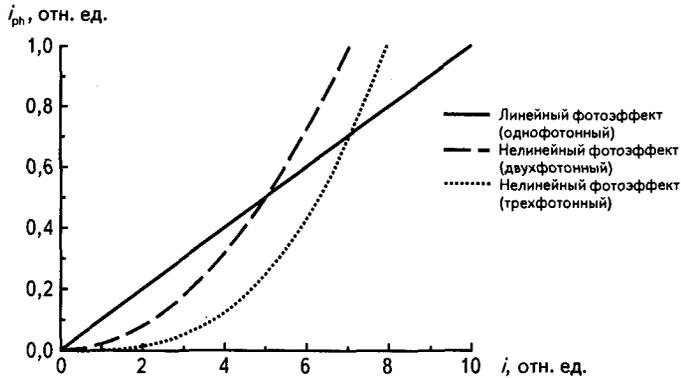


Рис. 3.3. Зависимость фототока от интенсивности излучения в случае линейного и нелинейного фотоэффекта

Видно, что в области малых интенсивностей излучения доминирует линейный фотоэффект, в области больших интенсивностей — нелинейный. Если энергии одного фотона недостаточно для преодоления работы выхода, однофотонный фотоэффект будет отсутствовать и останется только нелинейный процесс с числом фотонов, удовлетворяющих неравенству

$$n \geq \left[\frac{A}{\hbar\omega} \right].$$

Здесь квадратные скобки обозначают целую часть числа.

В случае умеренных интенсивностей излучения

$$I \ll I_a \cong 3,52 \cdot 10^{16} \text{ Вт/см}^2$$

вероятность $(n + 1)$ -квантового фотоэффекта меньше, чем вероятность n -квантового, так что трехфотонная кривая на рис. 3.3 в области малых интенсивностей проходит ниже двухфотонной кривой. Для интенсивностей лазерного излучения, превосходящих атомную интенсивность (1.8), ситуация может быть противоположной, тогда имеет место явление *надпороговой ионизации*.

При описании атомного фотоэффекта в уравнение (3.10) вместо работы выхода нужно подставить потенциал ионизации атома I_p . Потенциал ионизации определяется как минимальная энергия, необходимая для удаления одного атомного электрона в состояние с нулевой кинетической энергией. Потенциал ионизации атома водорода равняется одному ридбергу, или 13,6 эВ. Для многоэлектронных атомов вводится понятие потенциала ионизации электронной подболочки, характеризуемой главным и орбитальным квантовыми числами I_{nl} . Чем меньше радиус электронной подболочки, тем выше потенциал ее ионизации. Если атом имеет несколько электронных подболочек, то под потенциалом ионизации атома понимается потенциал ионизации его внешней электронной оболочки. Потенциалы ионизации нейтральных атомов изменяются в пределах от 3,89 эВ (для цезия) до 24,59 эВ (для гелия).

Помимо рассмотренного выше внешнего фотоэффекта возможен *внутренний фотоэффект*, когда электрон вещества в результате поглощения фотона переходит из валентной зоны, где его движение ограничено атомным размером, в зону проводимости, в которой он может распространяться по кристаллу. Тогда в уравнении (3.10) работа выхода должна быть заменена на ширину запрещенной зоны E_g . Эта величина для такого важного полупроводника как арсенид галлия, который используется для создания различных типов диодов и быстродействующих интегральных схем, при комнатной температуре составляет 1,43 эВ. С помощью формулы (3.11) легко определить, что длина волны красной границы (однофотонного) внутреннего фотоэффекта в арсениде галлия составляет 870 нм, т. е. лежит в ближнем инфракрасном диапазоне, примыкающем к видимому спектру.

3.2. ЭФФЕКТ КОМПТОНА

В соответствии с классической теорией Дж. Томсона рассеяние электромагнитной волны в веществе происходит вследствие вынужденных колебаний электронов среды под действием электрического поля волны. Следствием этих колебаний является возникновение осциллирующего дипольного момента, который по известным законам классической электродинамики излучает вторичные электромагнитные волны, что на эксперименте фиксируется как рассеянная волна. Поскольку вынужденные колебания электронов

вещества происходят на частоте электромагнитной волны, то колебания дипольного момента и, соответственно, излучение вторичных волн будет происходить на той же частоте.

Таким образом, простейшее классическое рассмотрение говорит о том, что рассеяние электромагнитных волн в среде должно происходить без изменения частоты, изменяется только направление распространения излучения. Другой характерной чертой классического рассеяния является то обстоятельство, что рассеивающаяся электромагнитная волна взаимодействует со всеми электронами среды, находящимися в объеме луча.

Указанные характеристические черты классического рассеяния находятся в резком противоречии с результатом, полученным для рассеяния рентгеновского излучения, известным как эффект Комптона. Этот эффект, наряду с измерением спектра теплового излучения и фотоэффектом, явился одним из экспериментальных оснований квантовой физики. Он, в частности, продемонстрировал наличие у фотона не только энергии, но и импульса.

Эксперимент А. Комптона

Американский физик А. Комpton в начале 20-х гг. прошлого века проводил исследования по рассеянию жесткого рентгеновского излучения на мишенях легких элементов с помощью рентгеновского спектрометра У.Г. Брэгга. Данный спектрометр состоит из рентгеновской трубки, фильтров, коллиматоров, вращающегося кристалла, от которого под углом Брэгга происходило отражение излучения, так что угол падения задает значение длины волны, и детектора. Принципиальная схема установки Комптона изображена на рис. 3.4.

Комптоном был измерен спектр рассеянного на графитовой мишени под углом 90° излучения K_α -линии молибдена. Результаты измерений приведены на рис. 3.5, взятом из оригинальной статьи Комптона [2]. Максимум спектра первичного излучения (до рассеяния в графите) приходился на длину волны $\lambda_0 = 0,708 \text{ \AA}$ (штриховая линия на рис. 3.5), что соответствует энергии фотона 17,5 кэВ. Максимум спектра рассеянного излучения (сплошная кривая на рис. 3.5) приходился на длину волны $\lambda_\theta = 0,730 \text{ \AA}$, т.е. оказался сдвинут в длинноволновую сторону на $\Delta\lambda = 0,022 \text{ \AA}$ относительно первоначального положения. Как видно из двух графиков рис. 3.5, спектр рассеянного излучения как целое сдвинулся на вышеприведенное значение $\Delta\lambda$.

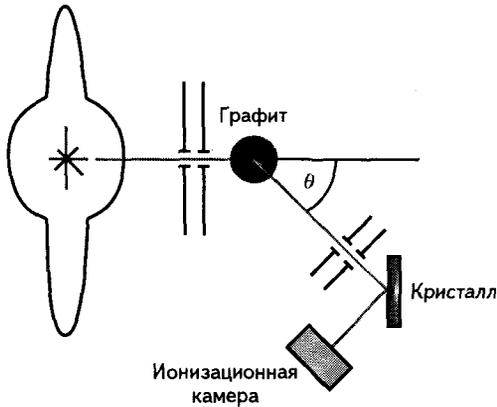


Рис. 3.4. Принципиальная схема установки А. Комптона

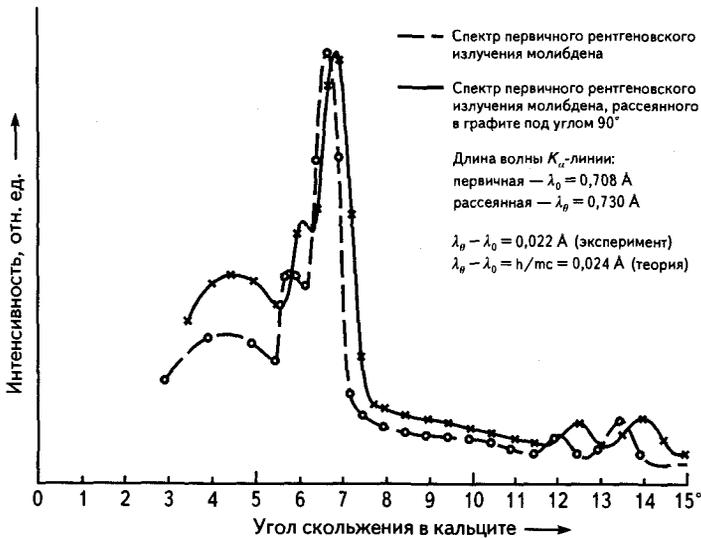


Рис. 3.5. График из оригинальной статьи А. Комптона (Phys. Rev. V. 21, № 5, p. 483, 1923)

С уменьшением угла рассеяния увеличение длины волны рассеянного излучения оказалось меньшим. Эксперименты, проведенные на других мишенях, показали, что сдвиг спектра рассеянного излу-



чения не зависит от природы рассеивателя, а с увеличением атомного номера материала мишени интенсивность рассеянного излучения уменьшалась.

Для объяснения полученных экспериментальных данных Комpton использовал квантовое представление о рентгеновском излучении как о потоке фотонов, которые обладают не только энергией $\varepsilon = \hbar\omega$ в соответствии с гипотезой Эйнштейна, но и импульсом, равным

$$p_{ph} = \hbar k = \hbar \frac{\omega}{c} n, \quad (3.13)$$

где k — волновой вектор излучения; n — единичный вектор в направлении распространения фотона. В рамках такой картины рассеяние рентгеновского луча в среде можно интерпретировать как рассеяние фотона на электроны вещества мишени в результате парного столкновения этих двух частиц. Поскольку энергия рентгеновского фотона составляет от единиц до десятков килоэлектрон-вольт, то в первом приближении электроны среды можно считать покоившимися до столкновения с фотоном. В процессе столкновения в зависимости от угла рассеяния фотона электрон получает от него импульс и энергию. В результате энергия фотона уменьшается, а длина волны излучения увеличивается, как это следует из формулы (3.13), если учесть, что $\omega = 2\pi c/\lambda$. Таким образом, увеличение длины волны рассеянного рентгеновского излучения есть следствие эффекта отдачи, возникающей в ходе фотон-электронного взаимодействия.

Оригинальное теоретическое рассмотрение эффекта

Для количественного описания эффекта Комpton использовал следующие два уравнения, выражающие закон сохранения энергии-импульса в ходе рассеяния фотона на электроны:

$$\left(\frac{m\beta c}{\sqrt{1-\beta^2}} \right)^2 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{c} \right)^2 + \left(\frac{\hbar\omega_\theta}{c} \right)^2 + 2 \frac{\hbar\omega_0}{c} \frac{\hbar\omega_\theta}{c} \cos\theta; \quad (3.14)$$

$$\hbar\omega_0 - \hbar\omega_\theta = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right), \quad (3.15)$$

где m — масса электрона; $\beta = v/c$ (v — скорость электрона после столкновения с фотоном); θ — угол рассеяния фотона; индекс «0»

обозначает соответствующую величину до рассеяния; индекс « θ » — после рассеяния. При записи этих уравнений использовались релятивистские формулы для импульса и энергии электрона. Правая часть равенства (3.15) представляет собой кинетическую энергию электрона среды после рассеяния, а левая часть равенства (3.14) равна импульсу электрона, полученному в результате отдачи. Система уравнений (3.14) и (3.15) содержит две неизвестные величины: β и ω_θ . Ее решение для частоты рассеянного излучения ω_θ имеет вид:

$$\omega_\theta = \frac{\omega_0}{1 + 2(\hbar\omega_0/mc^2)\sin^2(\theta/2)}. \quad (3.16)$$

Отсюда для длины волны рассеянного излучения находим

$$\lambda_\theta = \lambda_0 + \frac{2\hbar}{mc} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (3.17)$$

Величина $\Lambda_C = h/mc = 2,43 \cdot 10^{-10}$ см, фигурирующая в этом равенстве, называется комптоновской длиной волны электрона.

Из равенства (3.17) следует, что увеличение длины волны излучения при рассеянии в рентгеновском диапазоне составляет единицы процентов, а в гамма диапазоне достигает 200 % и более. Формула (3.17) говорит также о том, что изменение длины волны не зависит от самой длины волны и материала мишени (в приближении покоившегося электрона среды), что и наблюдалось на эксперименте. Изменение длины волны излучения при рассеянии на 90° согласно (3.17) равно комптоновской длине волны электрона (0,0243 Å), что на 10,5 % больше экспериментального значения (0,022 Å). Данное обстоятельство можно считать несомненным подтверждением квантовой гипотезы, использовавшейся при выводе равенства (3.17). Напомним, что эта формула была получена в предположении покоившегося электрона среды и в пренебрежении его связью с ядром атома вещества. С учетом этих упрощений можно считать 10 % точность соответствия теории и эксперимента вполне удовлетворительной.

Для отношения $\beta = v/c$ система уравнений (3.14) и (3.15) дает

$$\beta = 2 \frac{\hbar\omega_0}{mc^2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \frac{\sqrt{1 + (\hbar\omega_0/mc^2)(2 + \hbar\omega_0/mc^2)\sin^2(\theta/2)}}{1 + 2(\hbar\omega_0/mc^2)(1 + \hbar\omega_0/mc^2)\sin^2(\theta/2)}. \quad (3.18)$$

Из полученного выражения следует, что скорость электрона отдачи изменяется от нуля (для нулевого угла рассеяния фотона) до $0,8c$ при рассеянии гамма-излучения на большие углы. Зависимость (3.18) представлена на рис. 3.6 для трех начальных энергий фотона.

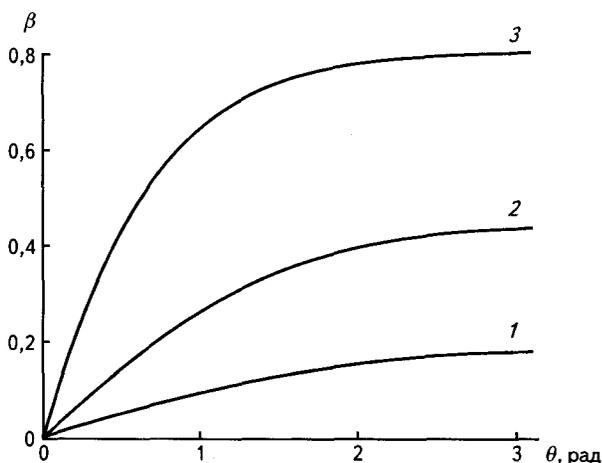


Рис. 3.6. Зависимость параметра $\beta = v/c$ от угла рассеяния фотона для различных величин отношения $\alpha = \hbar\omega_0/mc^2$:
 1 — $\alpha = 0,1$; 2 — $\alpha = 0,3$; 3 — $\alpha = 1$

Кривой 1 на рис. 3.6 соответствует энергия фотона до рассеяния 51,1 кэВ, кривой 2 — 153,3 кэВ и кривой 3 — 511 кэВ.

А. Комптон в цитируемой оригинальной статье 1923 г. сделал любопытное замечание. Он сравнил равенство (3.16) для частоты рассеянного фотона с предсказанием классического эффекта Доплера, примененного к рассеянию излучения на электроне, движущееся со скоростью $\beta'c$ в направлении распространения излучения до рассеяния. Выражение для рассеянной частоты, следующее из преобразований Лоренца, может быть представлено в следующей форме

$$\omega_{\theta} = \frac{\omega_0}{1 + \frac{2\beta'}{1-\beta'} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \quad (3.19)$$

Видно, что правая часть (3.19) совпадает с правой частью равенства (3.16), если положить

$$\beta' = \frac{\alpha}{1 + \alpha},$$

где для краткости введено обозначение

$$\alpha = \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}.$$

Таким образом, если рассматривать только эффект изменения частоты в ходе рассеяния фотона на электронах мишени, то реальный электрон, испытывающий отдачу, можно заменить на «классический» электрон,двигающийся со скоростью $\beta' = \alpha/(1 + \alpha)$, которую Комpton назвал эффективной скоростью рассеивающего электрона. Тогда формулы, описывающие изменение частоты (3.16) и (3.19), совпадут. Искусственность данной замены, однако, видна уже из того, что эффективная скорость электрона $\beta'c$ оказывается зависящей от частоты рассеиваемого излучения. Кроме того, нужно считать, что рассеивающие электроны среды двигаются вдоль направления распространения исходного луча, что противоречит реальной ситуации. Поэтому единственным физически удовлетворительным объяснением эффекта Комптона является фотонная картина электромагнитного излучения и вытекающая из нее система уравнений (3.14) и (3.15).

Из формулы для изменения длины волны излучения в результате комптоновского рассеяния (3.17) следует, что относительная величина этого изменения порядка Λ_c/λ_0 . Поскольку комптоновская длина волны электрона $\Lambda_c = 0,024 \text{ \AA}$, то отсюда ясно, почему эффект Комптона наблюдается для рентгеновского и более коротковолнового диапазона, а не в области оптических или ультрафиолетовых частот. Действительно, в последнем случае длина волны излучения составляет тысячи и десятки тысяч ангстрем, так что ее относительное изменение в результате рассеяния на электронах среды не превышает $10^{-4}\%$. При таком малом относительном изменении длины волны использовавшиеся при выводе равенства (3.17), упрощающие предположения, становятся слишком грубыми. Это касается в первую очередь предположения о покоящемся свободном электро-не. Энергия фотона в видимом и ультрафиолетовом участках спектра порядка нескольких электрон-вольт, что по порядку величины совпадает



с энергией электронов внешних оболочек атомов, не говоря уже о внутренних электронах. В случае, когда энергия связи электрона больше энергии фотона, фотон-электронное рассеяние сопровождается передачей импульса отдачи тяжелому ядру атома. Фотон уже «не видит» отдельных электронов, а «воспринимает» атом как единое целое. В результате энергия отдачи, а с ней и изменение энергии/длины волны фотона становятся пренебрежимо малыми. Тогда имеет место рэлеевское рассеяние излучения на атоме без изменения частоты излучения. Напротив, при рассеянии фотонов с энергией в десятки кэВ и более импульс отдачи передается отдельным атомным электронам, которые выбиваются из атома, приобретая значительную кинетическую энергию. Эту энергию приближенно можно оценить по формуле

$$E_{\text{кин}} = \hbar\omega_0 \frac{\hbar\omega_0}{mc^2} \cos^2 \varphi, \quad (3.20)$$

где φ — угол между направлением скорости электрона отдачи и волновым вектором фотона до рассеяния. Данный угол связан с углом рассеяния фотона θ следующим приближенным соотношением

$$\text{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \text{tg} \varphi.$$

Таким образом, как и в случае теплового излучения, в эффекте Комптона квантовые свойства электромагнитного поля наиболее отчетливо проявляются на высоких частотах. В низкочастотном диапазоне остается адекватной волновая картина излучения.

Электроны отдачи с энергий, описываемой равенством (3.20), и углом вылета

$$\varphi \equiv \text{arctg}\left[\text{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]$$

наблюдались в опытах Вильсона и Боте, последовавших непосредственно за цитируемой работой Комптона в 1923 г. В этих экспериментах с помощью камеры Вильсона были зарегистрированы треки рассеянного фотона и выбитого им электрона отдачи. Таким образом, было получено прямое свидетельство проявления корпускулярных свойств электромагнитного излучения.

Формула (3.16) устанавливает однозначную связь между углом рассеяния и частотой рассеянного фотона. Если, например, спектр падающего излучения описывается дельта-функцией (является бесконечно узким), то и спектр рассеянного излучения представляет собой дельта-функцию со сдвинутой центральной частотой. На самом деле движение атомных электронов, не учитывающееся в вышеизложенном подходе, вследствие эффекта Доплера приводит к уширению спектра рассеянных по комптоновскому механизму фотонов. Так что бесконечно узкий спектр падающего излучения будет преобразовываться в спектр рассеянного излучения конечной ширины. Данная ширина в соответствии с формулами эффекта Доплера определяется произведением характерной скорости атомного электрона на модуль волнового вектора фотона.

Приведенное упрощенное описание эффекта не позволяет рассчитать угловое распределение рассеянных фотонов. Это можно сделать в рамках последовательного подхода, опирающегося на квантовую электродинамику. Теоретическое рассмотрение и экспериментальные данные говорят о том, что большая часть фотонов в эффекте Комптона рассеивается вперед, по направлению движения исходного пучка. С ростом энергии фотона угловая асимметрия рассеяния увеличивается, а интегральная по углу интенсивность рассеянного излучения убывает.

Из вышеприведенного рассмотрения следует, что в заданном направлении, вообще говоря, рассеиваются две компоненты излучения: со смещенной длиной волны (комптоновская составляющая) и с несмещенной длиной волны (рэлеевская или томсоновская составляющая). С ростом заряда ядра атома возрастает энергия связи его электронов, поэтому фотону становится все труднее выбить атомный электрон, и рассеяние идет по рэлеевскому каналу. Поэтому с ростом атомного номера вещества мишени вклад рэлеевской компоненты в рассеянное излучение увеличивается, а комптоновской уменьшается. Это обстоятельство также было впервые установлено Комптоном в цитируемой статье.

Комптон-эффект возможен при рассеянии фотонов на протонах и других заряженных частицах. В этом случае в формулы (3.16), (3.17) должна входить масса той частицы, на которой происходит рассеяние излучения. Поскольку эти массы как минимум на три порядка величины больше массы электрона, то изменение частоты фотона будет заметным только для высокоэнергетических гамма квантов.

Вследствие эффекта Комптона частота рассеивающегося фотона уменьшается, поскольку энергия отдачи уносится электроном вещества. Возможен, однако, и обратный процесс, когда рассеяние на высокоэнергетичном электроне приводит к увеличению энергии фотона и длина волны излучения уменьшается. Этот процесс называется *обратным эффектом Комптона*. В астрофизике он привлекается для объяснения изменения спектрального состава реликтового излучения в ядрах галактик и квазарах. Напомним, что реликтовое излучение представляет собой изотропное космическое излучение, возникшее согласно современным представлениям в результате Большого взрыва, оно также называется фоновым галактическим излучением. Спектр реликтового излучения может быть описан формулой Планка с эффективной температурой 2,7 К, что соответствует радиодиапазону частот. Радиокванты реликтового излучения, рассеиваясь на релятивистских электронах, вследствие обратного эффекта Комптона могут увеличить свою энергию до значений порядка нескольких килоэлектрон-вольт. Тем самым объясняется появление рентгеновской компоненты фонового галактического излучения. В плазме за счет обратного эффекта Комптона может происходить перекачка энергии колебаний продольного электрического поля в электромагнитное излучение. В технике обратный эффект Комптона используется как механизм получения коротковолнового излучения с помощью излучения меньшей частоты.

Литература

1. *Эйнштейн А.* Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света. Собрание научных трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966, с. 92—108.
2. *Compton A.H.* A Quantum theory of the scattering of X-rays by light elements. Phys. Rev. 1923. V. 21, № 5, pp. 483—502.

4.1. ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА В ПОЛЕ ТЕПЛОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Рассмотрим простейший квантовый объект — двухуровневую систему, находящуюся в поле теплового излучения в состоянии термодинамического равновесия с ним. Такое рассмотрение было впервые проведено А. Эйнштейном в 1916 г. [1].

Итак, по предположению квантовая система состоит из нижнего уровня с энергией E_m и верхнего уровня с энергией $E_n > E_m$. Тепловое излучение вызывает переходы между этими уровнями, причем таким образом, что устанавливается режим динамического равновесия. В этом случае число переходов в двухуровневой системе в единицу времени и в единице объема вверх $\dot{N}\uparrow$ равно числу аналогичных переходов вниз $\dot{N}\downarrow$:

$$\dot{N}\uparrow = \dot{N}\downarrow. \quad (4.1)$$

Переходы вверх вызываются поглощением теплового излучения, так что для их числа $\dot{N}\uparrow$ можно записать равенство

$$\dot{N}\uparrow = w_{mn} N_m = B_{mn} \rho(\omega) N_m, \quad (4.2)$$

где B_{mn} — коэффициент Эйнштейна для поглощения; w_{mn} — вероятность в единицу времени перехода $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$, вызванного поглощением излучения,

$$w_{mn} = B_{mn} \rho(\omega). \quad (4.3)$$

В равенстве (4.2) также фигурирует величина N_m — концентрация двухуровневых систем, находящихся на m -м энергетическом уровне

(населенность m -го уровня). Поскольку система находится в состоянии термодинамического равновесия, концентрация N_m равна

$$N_m = N_0 g_m \exp\left(-\frac{E_m}{T}\right), \quad (4.4)$$

где g_m — статистический вес данного энергетического уровня; N_0 — нормировочный множитель с размерностью концентрации; T — температура в энергетических единицах. Для населенности верхнего уровня в полной аналогии с формулой (4.4) имеем

$$N_n = N_0 g_n \exp\left(-\frac{E_n}{T}\right). \quad (4.5)$$

Переходы двухуровневой системы с верхнего уровня на нижний уровень вызываются двумя причинами. Во-первых, имеет место самопроизвольный переход с испусканием фотона — спонтанное излучение. Этот процесс с точки зрения классической электродинамики происходит без внешнего вынуждающего действия. Он ответствен за люминесценцию, так что был известен в физике до обсуждаемой работы Эйнштейна 1916 г. Вероятность в единицу времени спонтанного излучения определяется коэффициентом Эйнштейна для спонтанного излучения A_{nm} :

$$w_{nm}^{\text{sp}} = A_{nm}. \quad (4.6)$$

Во-вторых, переходы в двухуровневой системе сверху вниз могут происходить вынужденным образом — под действием внешнего электромагнитного поля и сопровождаться излучением фотона. Это так называемое индуцированное (или вынужденное) излучение, введенное в квантовую теорию А. Эйнштейном. Вероятность этого процесса в единицу времени равна

$$w_{nm}^{\text{ind}} = B_{nm} \rho(\omega), \quad (4.7)$$

где B_{nm} — коэффициент Эйнштейна для индуцированного излучения. С учетом сказанного для числа переходов квантовой системы вниз имеем

$$\dot{N}_{\downarrow} = A_{nm} N_n + B_{nm} \rho(\omega) N_n. \quad (4.8)$$

Подставляя формулы (4.2) и (4.8) в равенство (4.1), находим для спектральной плотности энергии следующее выражение:

$$\rho(\omega) = \frac{A_{nm}/B_{nm}}{(g_m B_{mn}/g_n B_{nm}) \exp[(E_n - E_m)/T]} - 1. \quad (4.9)$$

Согласно сделанному предположению данное равенство должно выполняться для спектральной плотности теплового излучения $\rho_T^{(P)}(\omega)$, которая дается формулой Планка (2.8). Сравнивая правые части равенств (2.8) и (4.9), находим условие на частоту излучения:

$$\hbar\omega = E_n - E_m, \quad (4.10)$$

а также соотношения между коэффициентами Эйнштейна:

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \quad (4.11)$$

и

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm}. \quad (4.12)$$

Заметим, что если коэффициент Эйнштейна для индуцированного излучения положить равным нулю ($B_{nm} = 0$), то, как это следует из (4.9), вместо формулы Планка для теплового излучения получается формула Вина. Таким образом, введение процесса индуцированного излучения необходимо с точки зрения правильного описания электромагнитного поля. Условие (4.10) на частоту связано с тем обстоятельством, что ширина спектра теплового излучения (см. рис. 2.1) намного превосходит ширину спектральных линий, излучаемых атомами.

4.2. ПОЛУКЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ БОРА

Исследование взаимодействия электромагнитного излучения с атомами началось с регистрации спектров атома водорода. В результате обобщения экспериментальных данных в 1885 г. было получено простое соотношение, с высокой степенью точности описывающее измеренные к тому времени значения длин волн λ_{mn} атома водорода (формула Бальмера):

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4.13)$$



где m и n — целые числа ($m < n$); $R \equiv 109\,739\text{ см}^{-1}$ — постоянная Ридберга.

В зависимости от величины целого числа m водородный спектр разделяется на несколько спектральных серий. Так, значению $m = 1$ соответствует серия Лаймана (обозначение серии L_n , $n \geq 2$), длины волн которой лежат в ультрафиолетовой области. Если $m = 2$, то говорят о серии Бальмера (H_n , $n \geq 3$), относящейся к видимому излучению. Наконец, если $m = 3$, то формула (4.13) описывает серию Пашена, лежащую в инфракрасном диапазоне, в котором лежат также серия Брэкета ($m = 4$) и серия Пфунда ($m = 5$). Спектральные диапазоны серий Лаймана и Бальмера не пересекаются с другими, спектральные диапазоны серий Пашена, Брэкета и Пфунда имеют пересечение.

Формула Бальмера (4.13) стала важным экспериментальным основанием для построения теории атома водорода и установления основных закономерностей взаимодействия электромагнитного излучения с атомами.

Создание соответствующей теории, однако, натолкнулось на непреодолимые в рамках классической физики трудности. После проведения Резерфордом своих знаменитых опытов по рассеянию альфа-частиц (1911 г.) в теории атома господствовала планетарная модель. Согласно этой модели атом состоит из тяжелого положительно заряженного ядра, расположенного в центре, и отрицательно заряженных электронов, вращающихся вокруг ядра. Классическая электродинамика предсказывала, что в таком случае ускоренно движущиеся электроны должны излучать электромагнитные волны, теряя энергию и в конечном счете упасть на ядро. Таким образом, классическая физика не только была не в состоянии объяснить экспериментальную формулу (4.13), но и само существование стабильных атомов с ее точки зрения оказывалось невозможным.

Чтобы преодолеть указанные трудности, Н. Бор в 1913 г. построил свою теорию атома водорода (атом Бора), основываясь на трех сформулированных им постулатах.

1. Электроны в атомах находятся в особых, стационарных состояниях $|n\rangle$, соответствующих круговым орбитам, параметры которых определяются условием квантования момента количества движения:

$$M_n = n\hbar. \quad (4.14)$$

2. В стационарных состояниях атомные электроны не излучают.

3. Излучение и поглощение электромагнитных волн происходит в результате перехода атомного электрона из одного стационарного состояния (с энергией E_n) в другое стационарное состояние (с энергией E_m). Круговая частота излучения (в случае $E_n > E_m$) равна

$$\omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (4.15)$$

Следует отметить, что в условии квантования момента количества движения (4.14) вошла постоянная Планка, использовавшаяся впервые для квантования энергии радиационного осциллятора.

Постулаты Бора так же, как и квантование энергии осциллятора в теории теплового излучения, являлись чужеродной вставкой, противоречащей мировоззренческим основам классической физики. Тем не менее, так же как и в случае теплового излучения, положения, введенные в теорию исключительно для согласования с опытом, не только позволили объяснить имеющиеся к тому времени экспериментальные данные, но и стали своего рода «зародышем» новой, квантовой физики.

Для определения энергии электрона в атоме Бора, помимо условия квантования момента количества движения (4.14), используется второй закон Ньютона для движения электрона по круговой орбите под действием кулоновской силы притяжения к ядру. В результате получается следующая система алгебраических уравнений:

$$m_e r_n v_n = n\hbar; \quad (4.16)$$

$$m_e \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{r_n^2}, \quad (4.17)$$

где v_n и r_n — подлежащие определению скорость электрона на n -й орбите и радиус n -й орбиты; m_e — масса электрона. При записи уравнения (4.17) было использовано выражение для центростремительного ускорения, а также предположено, что заряд ядра равен $Z|e|$. Таким образом, (4.16)—(4.17) описывают *водородоподобный ион*, т. е. атом с произвольным зарядом ядра и одним электроном. Атому водорода, очевидно, соответствует значение $Z = 1$. Кроме того, здесь и далее пренебрегаем различием между приведенной массой атома и массой электрона.

Система уравнений (4.16)—(4.17) отражает эклектичность теории атома Бора: уравнение (4.16) является квантовым условием и

содержит постоянную Планка \hbar , в то время как уравнение (4.17), представляющее собой второй закон Ньютона, имеет чисто классическое происхождение.

Решение системы (4.16)–(4.17) имеет вид

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar} = \frac{Z}{n} v_a, \quad v_a = \alpha c \cong 2,188 \cdot 10^8 \text{ см/с}; \quad (4.18)$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m_e e^2} = \frac{n^2}{Z} a_B, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}. \quad (4.19)$$

В формуле (4.18) для скорости электрона на n -й орбите введена *постоянная тонкой структуры* α — фундаментальная безразмерная константа, характеризующая величину электромагнитного взаимодействия,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}.$$

Из равенств (4.18), в частности, следует, что для умеренных зарядов ядра атомный электрон является нерелятивистской частицей, так что оправдано описание его движения в рамках ньютоновской механики.

Величины v_a (скорость электрона на первой боровской орбите) и a_B (боровский радиус) являются соответственно единицей скорости и длины в атомной системе единиц (или системе единиц Хартри), определяемой равенствами:

$$e = m_e = \hbar = 1. \quad (4.20)$$

Система единиц Хартри широко используется в атомных расчетах. Она позволяет существенно упростить аналитические вычисления, поскольку в этой системе не выписываются константы e , m_e и \hbar в промежуточных формулах, а результат переводится в обычные (размерные) единицы с использованием известных размерных значений атомных единиц. Приведем здесь еще атомную единицу времени:

$$\tau_a = \frac{a_B}{v_a} = \frac{\hbar^3}{m_e e^4} \cong 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ с}. \quad (4.21)$$

Обратная к атомной единице времени величина ν_a представляет собой атомную единицу частоты, численное значение которой равно: $\nu_a \cong 4,13 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

Используя полученные выражения (4.18) и (4.19), можно найти кинетическую, потенциальную и полную энергии электрона на n -й атомной орбите:

$$T_n = \frac{m_e v_n^2}{2} = \frac{Z^2}{2n^2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{Z^2}{2n^2} \alpha^2 m_e c^2; \quad (4.22)$$

$$U_n = -\frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \alpha^2 m_e c^2; \quad (4.23)$$

$$E_n = T_n + U_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = -\frac{Z^2}{2n^2} \alpha^2 m_e c^2. \quad (4.24)$$

Правые части в формулах (4.22)—(4.24) представляют собой выражения для энергии атомного электрона на n -й орбите через энергию покоя электрона и постоянную тонкой структуры. Такая запись явно демонстрирует малость энергии электромагнитного взаимодействия, которая определяется квадратом константы $\alpha \ll 1$. Знак минус в выражении для потенциальной энергии (4.23) отражает тот факт, что разноименные заряды электрона и ядра обуславливают силу притяжения и соответственно отрицательность потенциальной энергии. Из равенств (4.22) и (4.23) вытекает соотношение

$$U_n = -2T_n, \quad (4.25)$$

представляющее собой известную из классической механики теорему вириала для системы с потенциальной энергией, обратно пропорциональной расстоянию между частицами.

Единица измерения энергии в системе атомных единиц равна

$$\varepsilon_a = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \alpha^2 m c^2 \cong 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27,2 \text{ эВ}. \quad (4.26)$$

Здесь введена внесистемная единица энергии — электронвольт, величина которой соответствует атомному масштабу энергий: $1 \text{ эВ} \cong 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. Помимо атомной единицы энергии (4.26), в



атомной физике широко используется другая единица энергии — ридберг, определяемая согласно равенству:

$$Ry = \frac{\varepsilon_a}{2} \cong 13,6 \text{ эВ.} \quad (4.27)$$

В этих единицах выражение для энергии электрона на n -й орбите атома Бора принимает особенно простой вид:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry. \quad (4.28)$$

Отметим, что целое неотрицательное число n , фигурирующее в равенстве (4.28), отвечает главному квантовому числу электронного состояния в последовательной квантовой теории атома водорода. Формула (4.28) описывает *дискретный* спектр энергий электрона в водородоподобном атоме. Отрицательность полной энергии в дискретном спектре с точки зрения классической механики отвечает финитности движения электрона, а на квантово-механическом языке — связанности состояния. Наряду с дискретным спектром атомный электрон обладает *непрерывным* спектром, которому соответствуют положительные значения энергии. В непрерывном спектре движение электрона инфинитно, соответствующие состояния называются свободными. Нулевое значение энергии электрона является границей дискретного и непрерывного спектра. Энергия n -го связанного состояния, взятая с обратным знаком, представляет собой потенциал ионизации данного состояния. Потенциал ионизации основного состояния называется потенциалом ионизации атома и обозначается I_p .

Из формул (4.15) и (4.28) находим для частот излучения водородоподобного иона следующее выражение:

$$\omega_{mn} = \frac{Z^2 Ry}{\hbar} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.29)$$

Переписывая (4.29) через длины волн, получаем

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{Z^2 Ry}{2\pi\hbar c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.30)$$

Сравнивая равенство (4.30) для атома водорода ($Z = 1$) с формулой Бальмера (4.13), находим, что данные выражения совпадают, если

$$R = \frac{Ry}{2\pi\hbar c}. \quad (4.31)$$

Легко проверить, используя численные значения констант, что равенство (4.31) действительно выполняется.

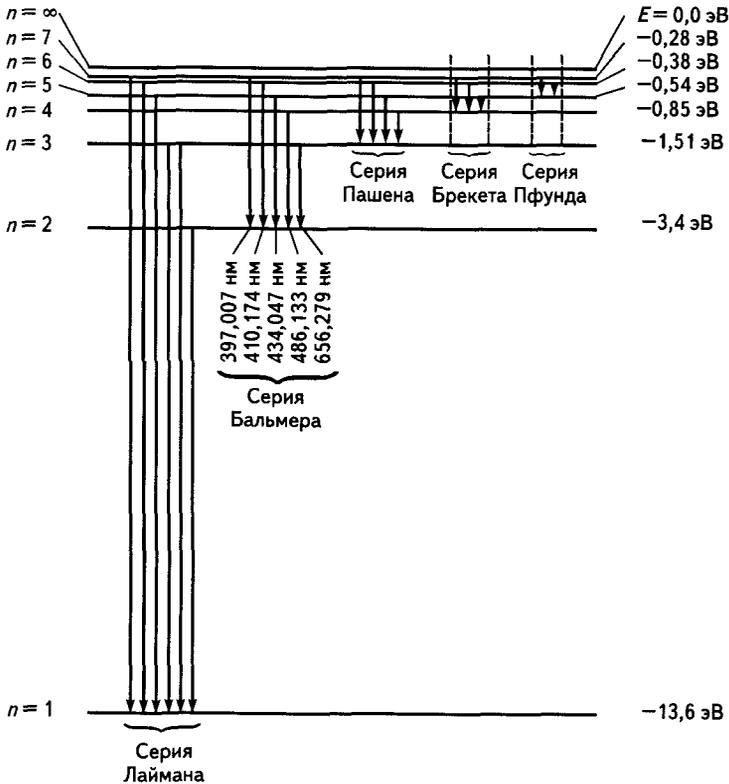


Рис. 4.1. Переходы между уровнями энергии в атоме водорода, формирующие различные серии линейчатого спектра

Переходы между уровнями энергии атома водорода, отвечающие в соответствии с постулатами Бора и формулой (4.30) различным сериям линейчатого спектра, представлены на рис. 4.1.



Таким образом, теория атома Бора воспроизводит экспериментальную формулу Бальмера (4.13) для длин волн излучения атома водорода. Это явилось крупным успехом данной теории и, что особенно важно, подтвердило необходимость введения квантовых представлений не только в теорию излучения, но и в микротерию вещества.

Отметим, что с формальной точки зрения вместо условия квантования момента количества движения (4.14) предпочтительнее пользоваться равенством (4.16), которое может быть получено как условие на де-бройлевскую длину волны атомного электрона на n -й орбите:

$$\lambda_n^{(\text{DB})} n = 2\pi r_n. \quad (4.32)$$

Легко проверить, что (4.32) сводится к (4.16), если воспользоваться определением де-бройлевской длины волны электрона:

$$\lambda^{(\text{DB})} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m_e v}. \quad (4.33)$$

Равенство (4.32) отвечает условию на длину волны незатухающего колебания на окружности, соответствующей n -й орбите атома Бора.

Дело в том, что на самом деле уравнение (4.14) никогда не выполняется точно. В реальных атомах величина момента количества движения удовлетворяет неравенству

$$M_n \leq \sqrt{n(n-1)}\hbar.$$

Правильный результат для энергии (4.28) получился вследствие компенсации указанной неточности и того, что $M_n \neq p_n r_n$, т. е. собственное значение момента количества движения не равно произведению собственных значений импульса и координаты.

Теория Бора оказалась неприменимой к атомам, содержащим более чем один электрон. Кроме того, даже в случае водородоподобного иона теория Бора предсказывает только длины волн излучения, но не интенсивности и поляризации. Она, однако, сыграла важную роль в истории квантовой физики, поскольку послужила отправной точкой для развития последовательной квантово-механической теории. Чтобы отметить данную преемственность, теорию атома Бора называют иногда старой квантовой теорией. Теорию Бора можно также назвать полуклассической, поскольку система ее основных уравнений (4.16)–(4.17), как уже отмечалось выше, содержит как квантовое (4.16), так и классическое (4.17) уравнение.

4.3. СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ И СИЛА ОСЦИЛЛЯТОРА

Вышеизложенная теория Бора является не только теорией атома водорода, но и теорией взаимодействия электромагнитного излучения с атомом, так как важные черты этого взаимодействия описываются вторым и третьим постулатами Бора. Дальнейшее развитие теории взаимодействия излучения с атомами может быть осуществлено, не прибегая к последовательному квантово-электродинамическому формализму, а используя так называемый *принцип соответствия* в духе полуклассического подхода Бора. Отправной точкой такого рассмотрения является выражение для мощности дипольного излучения, известное из классической электродинамики. Оно имеет вид [2]

$$Q(t) = \frac{2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}(t)|^2, \quad (4.34)$$

где $\mathbf{d}(t)$ — дипольный момент частицы с зарядом e , под которой в дальнейшем будем понимать электрон,

$$\mathbf{d}(t) = e\mathbf{r}(t). \quad (4.35)$$

Две точки над символом дипольного момента в формуле (4.34) обозначают вторую производную по времени. Критерий применимости дипольного приближения, в рамках которого получена формула (4.34), может быть сформулирован в виде неравенства

$$\lambda \gg a, \quad (4.36)$$

где a — размер области пространства, ответственной за излучение; λ — длина волны излучения. В случае атома, когда $a \approx 10^{-8}$ см, условие (4.36) охватывает широкий диапазон длин волн вплоть до жесткого рентгеновского излучения.

Вторая производная по времени от дипольного момента, фигурирующая в правой части равенства (4.34), элементарно выражается через ускорение электрона \mathbf{w} : $\ddot{\mathbf{d}} = e\mathbf{w}$. С учетом этого формула (4.34) переписывается в виде

$$Q = \frac{2e^2 w^2}{3c^3}. \quad (4.37)$$



Таким образом, в рамках классической физики ускоренно движущаяся заряженная частица будет терять свою энергию на дипольное излучение со скоростью, определяемой формулой (4.37). Заметим, что потеря энергии зарядом, находящимся в кулоновском поле, приводит не к уменьшению, а к увеличению его кинетической энергии. Это видно и из квантовых формул (3.10)—(3.12). Увеличение кинетической энергии заряда сопровождается в два раза большим уменьшением его потенциальной энергии [см. формулу (3.13)], что связано с уменьшением расстояния до центра кулоновского поля. В результате полная энергия электрона уменьшается.

В случае периодического движения заряда с круговой частотой ω_0 , как это имеет место с атомным электроном, представляет интерес мощность излучения, усредненная по периоду движения $T = 2\pi/\omega_0$. Для того чтобы произвести это усреднение в формуле (4.34), воспользуемся следующим равенством, справедливым для действительной периодической функции $f(t)$:

$$\langle f(t)^2 \rangle_T \equiv \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t)^2 dt = 2 \sum_{n=1}^{\infty} |f_n|^2, \quad (4.38)$$

где f_n — n -я гармоника разложения в ряд Фурье функции $f(t)$,

$$f_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \exp(-n\omega_0 t) dt. \quad (4.39)$$

При выводе формулы (4.38) было предположено, что среднее по периоду от рассматриваемой функции равно нулю, т. е. $f_0 = 0$. Заметим, что коэффициент 2 в правой части равенства (4.38) связан с учетом вклада отрицательных гармоник ряда Фурье ($n < 0$).

Пользуясь равенством (4.38), в котором положено $f(t) = \ddot{\mathbf{d}}(t)$, для усредненной по периоду мощности дипольного излучения получаем из (4.34) следующее выражение:

$$\langle Q(t) \rangle_T = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n, \quad (4.40)$$

где

$$Q_n = \frac{4}{3c^3} |(\ddot{\mathbf{d}})_n|^2. \quad (4.41)$$

С учетом того, что

$$(\ddot{\mathbf{d}})_n = -(n\omega_0)^2 (\mathbf{d})_n, \quad (4.42)$$

из формулы (4.41) находим

$$Q_n = \frac{4(n\omega_0)^4}{3c^3} |(\mathbf{d})_n|^2. \quad (4.43)$$

Формула (4.43) описывает мощность дипольного излучения на частоте n -й гармоники $\omega_n = n\omega_0$. В частности, мощность излучения на частоте периодического движения электрона ω_0 ($n = 1$) равна:

$$Q(\omega_0) = \frac{4\omega_0^4}{3c^3} |\mathbf{d}(\omega_0)|^2. \quad (4.44)$$

Здесь мы переобозначили первую Фурье-гармонику дипольного момента: $\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}(\omega_0)$.

Заменяем теперь в формуле (4.44) Фурье-гармонику дипольного момента на его матричный элемент, вычисленный между состояниями $|m\rangle$ и $|n\rangle$ [$\Psi_{m,n}(\mathbf{r})$ — волновые функции этих состояний]:

$$\mathbf{d}(\omega_0) \rightarrow \mathbf{d}_{mn} \equiv \langle m | \mathbf{d} | n \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi_m^*(\mathbf{r}) \mathbf{d} \Psi_n(\mathbf{r}), \quad (4.45)$$

а частоту периодического движения ω_0 на частоту перехода $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$:

$$\omega_0 \rightarrow \omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (4.46)$$

В результате вместо формулы (4.44) получим

$$Q_{mn} = \frac{4\omega_{mn}^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{mn}|^2. \quad (4.47)$$

Величина (4.47) может быть названа мощностью электромагнитного излучения при переходе атомного электрона из стационарного состояния $|n\rangle$ в стационарное состояние $|m\rangle$. Она описывает интенсивность излучения различных спектральных серий атома водорода: Лаймана ($m = 1$), Бальмера ($m = 2$), Пашена ($m = 3$) и т. д. Надо, однако, иметь в виду, что, в отличие от классической мощности излучения (4.34), величину (4.47) нужно понимать в статистическом смысле, т. е. как результат усреднения по ансамблю атомов.

Если теперь мощность излучения (4.47) разделить на энергию рассматриваемого перехода $\Delta E_{mn} = \hbar\omega_{mn}$, то получим величину, имеющую размерность обратного времени, которая совпадает с коэффициентом Эйнштейна для спонтанного излучения A_{mn} :

$$\frac{Q_{mn}}{\Delta E_{mn}} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3} |d_{mn}|^2 = A_{mn} = \frac{1}{\tau_{mn}}. \quad (4.48)$$

В последнем равенстве формулы (4.48) введено время жизни τ_{mn} состояния $|n\rangle$ по отношению к его спонтанному распаду с переходом в нижележащее состояние $|m\rangle$. Это время для перехода $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ в атоме водорода равно: $\tau_{12} \approx 1,6 \cdot 10^{-9}$ с.

Таким образом, использование формулы классической электродинамики (4.34) и замен (4.45) и (4.46) позволили получить квантовый результат для мощности излучения спектральных линий (4.47) и вероятности спонтанного излучения (4.48). Это обстоятельство является отражением *принципа соответствия* между классической и квантовой физикой. Данный принцип может быть сформулирован следующим образом. Квантово-механические выражения получаются из классических, если в последних Фурье-компоненты физических величин заменить на матричные элементы этих величин. Причем частота квантового перехода должна совпадать с частотой Фурье-компоненты [3].

Любопытно отметить, что наличие конечного времени жизни возбужденного состояния $|n\rangle$ может быть интерпретировано в духе принципа соответствия, как «падение» электрона на ядро за счет излучения фотонов — тот самый процесс, против которого «борется» второй постулат Бора. Это «падение» продолжается до тех пор, пока электрон не достигнет основного состояния $m = 1$, обладающего наименьшей возможной с точки зрения квантовой физики энергией.

Чтобы выяснить физическое обоснование второго постулата Бора, введем классический период вращения электрона на n -орбите:

$$T_n = \frac{2\pi r_n}{v_n} = n^3 2\pi\tau_a. \quad (4.49)$$

При записи формулы (4.49) были использованы выражения (3.6), (3.7) и (3.9). Оценим теперь отношение периода (4.49) ко времени жизни τ_{mn} . Пользуясь (4.48), (4.49) и полагая, что $r_{mn} \approx a_B R(m, n)$, где

$R(m, n)$ — некоторая функция порядка и меньше единицы, приближенно имеем

$$\frac{T_n}{\tau_{mn}} \approx \frac{T_n}{\tau_{1n}} \approx (\alpha n)^3 R^2(1, n) \approx 4 \cdot 10^{-7} n^3 R^2(1, n), \quad (4.50)$$

где $n^3 R^2(1, n) \rightarrow 1$ для больших номеров n (см. асимптотическую формулу в табл. 4.1). Второе приближенное равенство в (4.50) отражает тот факт, что время жизни возбужденного состояния атома водорода определяется его переходом в основное состояние.

Из полученного соотношения (4.50) следует, что период обращения электрона по классической орбите на несколько порядков величины меньше времени жизни в данном состоянии $|n\rangle$. Таким образом, эти состояния с хорошей степенью точности можно считать стационарными в соответствии с первыми двумя постулатами Бора. Эта стационарность есть следствие малой величины постоянной тонкой структуры α , ответственной за электромагнитное взаимодействие.

Принцип соответствия между классической и квантовой физикой, конкретизированный для случая излучательных переходов в атоме, называется *спектроскопическим принципом соответствия*. Его можно сформулировать следующим образом: атом при взаимодействии с электромагнитным полем ведет себя как набор классических осцилляторов, обладающих собственными частотами, равными частотам переходов между атомными уровнями энергии. Это значит, что каждому переходу между атомными состояниями $|j\rangle$ и $|n\rangle$ ставится в соответствие осциллятор с собственной частотой ω_{nj} . Назовем эти осцилляторы осцилляторами переходов. Вклад осцилляторов переходов в отклик атома на электромагнитное воздействие пропорционален безразмерной величине, называемой *силой осциллятора*. Чем больше сила осциллятора, тем сильнее соответствующий переход. Сила осциллятора для перехода между состояниями дискретного спектра $|j\rangle \rightarrow |n\rangle$ — f_{nj} (в квантовой механике индексы состояний принято писать справа налево) определяется формулой

$$f_{nj} = \frac{2m_e \omega_{nj} |\langle n | \mathbf{d} | j \rangle|^2}{3e^2 \hbar g_j}, \quad (4.51)$$

где g_j — статистический вес j -го состояния. Из формулы (4.51) следует равенство $g_j f_{nj} = -g_n f_{jn}$, поскольку сила осциллятора для пере-



хода с уменьшением энергии отрицательна. Согласно своему физическому смыслу сила осциллятора одноэлектронного атома всегда меньше единицы.

Формулировка принципа соответствия с силой осциллятора в форме (4.51) отвечает дипольному приближению, критерий которого дается неравенством (4.36). В противном случае определение (4.51) должно быть обобщено, чтобы включить в себя недипольную часть взаимодействия электромагнитного излучения с атомными электронами. Кроме того, недипольность взаимодействия оказывается существенной, если матричный элемент дипольного момента в формуле (4.51) равен нулю. Такие переходы называются *дипольно-запрещенными* в противоположность *дипольно-разрешенным* переходам, когда $\langle n|d|j\rangle \neq 0$. Равенство или неравенство нулю дипольного момента перехода может быть предсказано на основании соображений симметрии состояний, между которыми происходит переход. Соотношения между характеристиками атомных состояний, позволяющие предсказать ненулевое значение величины $\langle n|d|j\rangle$, называются *правилами отбора для дипольного излучения*. Наиболее простой вид эти правила имеют для водородоподобного иона. Систематика его электронных состояний в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием весьма проста. Энергетический уровень с главным числом n [см. формулу (3.16)] имеет $2n^2$ -кратное вырождение, которое возникает следующим образом. Во-первых, имеется специфическое для водородоподобного иона вырождение по квантовому числу орбитального момента l : энергию E_n имеют состояния атомного электрона с $l = 0, 1, \dots, n - 1$, обозначаемые как $|n, l\rangle$. Напомним, что численным обозначениям $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$ соответствуют буквенные: $s, p, d, f, g, h, i, \dots$. Далее, каждое состояние $|n, l\rangle$ вырождено по значению проекции орбитального момента электрона на выделенную ось. Это вырождение носит общий характер и связано со сферической симметрией атомного потенциала. Квантовое число проекции момента количества движения m_l пробегает $2l + 1$ значение: $m_l = -l, -l + 1, \dots, l + 1, l$, чему соответствуют состояния $|n, l, m_l\rangle$. Наконец, электронные состояния $|n, l, m_l\rangle$ двукратно вырождены по проекции спина электрона, что в результате дает $2n^2$ -кратное вырождение энергетического уровня водородоподобного иона с главным квантовым числом n . Отметим, что данная классификация справедлива для состояний дискретного спектра. В случае непрерывного спектра имеется дополнительное

вырождение состояний, связанное с различными направлениями импульса электрона.

В терминах приведенной классификации состояний правила отбора для дипольного излучения водородоподобного иона сводятся к следующему. Разрешенными являются переходы, для которых орбитальное квантовое число изменяется на единицу: $l \rightarrow l \pm 1$. Магнитное квантовое число при этом изменяется не более чем на единицу $m_l \rightarrow m_l, m_l \pm 1$. В частности, если магнитное квантовое число не изменяется, то излучается (поглощается) линейно поляризованное излучение, в оставшихся случаях — циркулярно-поляризованное. Частным случаем правил отбора является тот факт, что средний дипольный момент атома в отсутствие внешних полей равен нулю: $\langle \mathbf{d} \rangle = 0$. Это обстоятельство может рассматриваться так же, как следствие сферической симметрии атома.

Помимо электронных переходов в дискретном спектре (связанно-связанные переходы), имеют место также переходы из связанных состояний в состояния непрерывного спектра (связанно-свободные переходы), для которых тоже вводится понятие силы осциллятора по формуле, аналогичной (4.51). Физически связанно-свободному переходу соответствует ионизация атома. В отличие от случая связанно-связанного перехода, сила осциллятора для связанно-свободного перехода в состояние с энергией $\varepsilon - f_{ej}$ уже не является безразмерной величиной. Размерность f_{ej} равняется обратной энергии, что соответствует нормировке волновой функции непрерывного спектра на дельта-функцию от энергии. Поэтому для связанно-свободного перехода вместо силы осциллятора используется понятие плотности силы осциллятора:

$$f_{ej} \rightarrow \frac{df_j}{d\varepsilon}.$$

Силы осцилляторов связанно-связанных и связанно-свободных переходов в атоме удовлетворяют так называемому *золотому правилу сумм*, которое для переходов из основного состояния выражается равенством

$$\sum_n f_{n0} + \int_{I_p}^{\infty} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon = N_e, \quad (4.52)$$

где I_p — потенциал ионизации атома; N_e — число электронов в атоме.

Силы осцилляторов для ряда электронных переходов в атоме водорода приведены в табл. 4.1, заимствованной из книги [4].

Таблица 4.1. Силы осцилляторов для атома водорода

Начальное состояние	1s	2s	2p		3s	3p
Конечное состояние	np	np	ns	nd	np	ns
$n = 1$	0	—	-0,139	—	—	0,026
$n = 2$	0,4162	0	0	—	0,141	0,145
$n = 3$	0,0791	0,4349	0,014	0,696	0	0
$n = 4$	0,0290	0,1028	0,0031	0,122	0,484	0,032
$n = 5$	0,0139	0,0419	0,0012	0,044	0,121	0,007
$n = 6$	0,0078	0,0216	0,0006	0,022	0,052	0,003
$n = 7$	0,0048	0,0127	0,0003	0,012	0,027	0,002
$n = 8$	0,0032	0,0081	0,0002	0,008	0,016	0,001
$\sum_{n=9}^{\infty} f_{n0}$	0,0109	0,0268	0,0007	0,023	0,048	0,002
Асимптотическая формула	$1,6n^{-3}$	$3,7n^{-3}$	$0,1n^{-3}$	$3,3n^{-3}$	$6,2n^{-3}$	$0,3n^{-3}$
Дискретный спектр	0,5650	0,6489	-0,119	0,928	0,707	0,121
Непрерывный спектр	0,4350	0,3511	0,008	0,183	0,293	0,010
Полная сумма	1,000	1,000	-0,111	1,111	1,000	0,111

Из этой таблицы вытекают следующие закономерности. Во-первых, для переходов с увеличением энергии сила осциллятора больше в случае увеличения орбитального квантового числа, т. е. переход $n, l \rightarrow n', l + 1$ сильнее перехода $n, l \rightarrow n', l - 1$, если $n < n'$. Во-вторых, сумма сил осцилляторов для переходов в непрерывный спектр уменьшается с ростом орбитального квантового числа начального состояния, т. е. состояния с большим орбитальным моментом труднее ионизировать. В-третьих, наибольшей силой осциллятора обладают переходы в состояние с ближайшим главным квантовым чис-

лом. В-четвертых, силы осцилляторов для переходов с нижних уровней в состояния с большими квантовыми числами $n \geq 10$ убывают как n^{-3} . Эти закономерности определяют вероятности соответствующих излучательных переходов в атоме водорода.

Важным свойством силы осциллятора для водородоподобного иона является независимость данной величины от заряда ядра иона Z . Это легко увидеть из определения (4.51). В нем фигурируют две величины, зависящие от заряда ядра: частота перехода ω_{jn} и матричный элемент дипольного момента перехода \mathbf{d}_{nj} . Если учесть, что $\omega_{jn} \propto Z^2$ [см. формулу (4.29)], а $\mathbf{d}_{nj} \propto Z^{-1}$ [по аналогии с (4.19)], то сразу получаем требуемое утверждение.

Поучительно вычислить силы осциллятора для переходов между уровнями энергии квантового гармонического осциллятора, спектр которого дается формулой (2.49). В этом случае формулу (4.51) можно переписать в виде:

$$f_{N'N} = \frac{2m\omega_0 \left| \langle N' | \hat{z} | N \rangle \right|^2}{\hbar}, \quad (4.53)$$

где $\langle N' | \hat{z} | N \rangle$ — подлежащий определению матричный элемент гармонического осциллятора с собственной частотой ω_0 и массой m . Оператор координаты осциллятора выражается через операторы уничтожения \hat{a} и рождения \hat{a}^+ следующим образом:

$$\hat{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a} + \hat{a}^+).$$

Воспользовавшись определениями (2.86), (2.87) и свойством ортогональности векторов состояний $|N\rangle$, для искомого матричного элемента имеем:

$$\langle N' | \hat{z} | N \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left[\sqrt{N+1} \delta(N', N+1) + \sqrt{N} \delta(N', N-1) \right], \quad (4.54)$$

где $\delta(m, n)$ — символ Кронекера. Подставляя равенство (4.54) в определение (4.53), находим простое соотношение:

$$f_{N'N} = (N+1)\delta(N', N+1) - N\delta(N', N-1). \quad (4.55)$$

Отсюда, в частности, следует, отличны от нуля силы осцилляторов только для переходов в ближайшие энергетические состояния —

правило отбора для линейного гармонического осциллятора. Кроме того, из формулы (4.55) видно, как выполняется правило сумм (4.52) с $N_e = 1$. Наконец, рассмотренный случай является примером ситуации, когда сила осциллятора может быть сколь угодно большой величиной.

4.4. КЛАССИЧЕСКИЙ ВЫВОД ВЫРАЖЕНИЙ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭЙНШТЕЙНА

Коэффициенты Эйнштейна были введены феноменологически для описания вероятности в единицу времени трех фундаментальных фотопроцессов: фотопоглощения, спонтанного излучения и вынужденного излучения при взаимодействии теплового излучения с двухуровневой системой (см. разд. 4.1). Последовательный вывод выражений для этих коэффициентов возможен только в рамках квантовой электродинамики, сложной физической дисциплины, рассматривающей излучение и вещество на квантовой основе. Тем не менее, если воспользоваться принципом соответствия и понятием силы осциллятора, соответствующие формулы можно получить классическим путем, что и будет сделано ниже.

Принцип спектроскопического соответствия позволяет представить атом при его взаимодействии с излучением в виде набора заряженных гармонических осцилляторов, отвечающих переходам между энергетическими уровнями атома $n \rightarrow j$ ($E_j > E_n$). Эти осцилляторы, описывающие отклик системы на электромагнитное возмущение, называются осцилляторами перехода. Их координата x_{nj} удовлетворяет уравнению (1.10), в правую часть которого в виде коэффициента подставлена сила осциллятора $f_{jn} \neq 0$ (дипольно-разрешенный переход):

$$\ddot{x}_{jn} + 2\delta_{jn}\dot{x}_{jn} + \omega_{jn}^2 x_{jn} = f_{jn} \frac{e}{m} E(t). \quad (4.56)$$

Здесь ω_{jn} — частота перехода,

$$\omega_{jn} = \frac{E_j - E_n}{\hbar};$$

δ_{nj} — константа затухания; e — заряд осциллятора, точки над символом координаты означают дифференцирование по времени, напря-

женность электрического поля $E(t)$ предполагается не зависящей от координаты [дипольное приближение (4.36)].

В отсутствии поля излучения осциллятор перехода покоится: $x_{jn} = 0$ и $\dot{x}_{jn} = 0$. Внешнее поле начинает его «раскачивать», сообщая энергию, — возникают вынужденные колебания осциллятора перехода, временная зависимость которых — $x_{jn}(t)$ — может быть найдена из уравнения (4.56).

В полной аналогии с изложением разд. 1.1 можно вместо формулы (1.14) получить следующее выражение для вынужденных колебаний осциллятора перехода $j \rightarrow n$:

$$x_{jn}(t) = f_{jn} \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E(\omega') \exp(-i\omega't) d\omega'}{\omega_{jn}^2 - \omega'^2 - 2i\omega'\delta_{jn}} \frac{d\omega'}{2\pi}, \quad (4.57)$$

где $E(\omega')$ — Фурье-образ напряженности электрического поля $E(t)$, определяемый равенством (1.13).

Колеблющийся заряженный осциллятор излучает электромагнитные волны в соответствии с формулой для мощности дипольного излучения (4.37). В случае колебаний под действием внешнего поля это излучение является вынужденным. Если же импульс внешнего поля закончился, а заряженный осциллятор еще колеблется, то соответствующее излучение является спонтанным. Вероятность в единицу времени спонтанного излучения на переходе между атомными уровнями энергии $j \rightarrow n$ дается коэффициентом Эйнштейна A_{nj} . Явный вид этого коэффициента может быть получен на основании классического рассмотрения с помощью спектроскопического принципа соответствия. Для этого нужно провести те же рассуждения, что были сделаны при выводе формул (1.46)—(1.47) с той разницей, что в случае осциллятора перехода квадрат его заряда, фигурирующий в равенствах (1.45), (4.37), должен быть умножен на силу осциллятора. Тогда вместо (1.47) получаем

$$A_{nj} = \frac{2f_{jn}e^2\omega_{jn}^2}{3mc^3}. \quad (4.58)$$

Формула (4.58) дает выражение для коэффициента Эйнштейна для спонтанного излучения через силу осциллятора соответствующего перехода. Отметим, что сила осциллятора может быть рассчитана теоретически либо определена экспериментально.

Если теперь в правую часть равенства (4.58) подставить выражение для силы осциллятора (4.51), то приходим к следующей формуле для коэффициента Эйнштейна для спонтанного излучения

$$A_{nj} = \frac{4\omega_{jn}^3 |d_{nj}|^2}{3g_j \hbar c^3}, \quad (4.59)$$

где d_{nj} — матричный элемент электрического дипольного момента.

Чтобы вывести формулу для коэффициента Эйнштейна для поглощения B_{jn} , оставаясь в рамках классической физики, исходим из равенства (4.57), из которого можно получить выражения для скорости осциллятора перехода

$$\dot{x}_{jn}(t) = -if_{jn} \frac{e}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' E(\omega') \exp(-i\omega' t) d\omega'}{\omega_{jn}^2 - \omega'^2 - 2i\omega' \delta_{jn}} \frac{d\omega'}{2\pi}. \quad (4.60)$$

Далее, аналогично выводу равенства (1.61), находим для усредненной по периоду мощности, поглощаемой на рассматриваемом переходе под действием излучения со спектральной плотностью энергии $\rho(\omega)$:

$$P_{jn} = f_{jn} \frac{2\pi^2 e^2}{3m} \rho(\omega_{jn}). \quad (4.61)$$

Напомним, что при получении данного соотношения предполагалось, что ширина спектра излучения много больше ширины спектра перехода в атоме. Что имеет место, например, для теплового излучения.

По определению коэффициент Эйнштейна для поглощения (при переходе атома из состояния $|n\rangle$ в состояние $|j\rangle$) равен

$$B_{jn} = \frac{w_{jn}}{\rho(\omega_{jn})}. \quad (4.62)$$

В соответствии с физической картиной процесса вероятность в единицу времени фотопоглощения w_{jn} равна отношению поглощаемой мощности к энергии перехода:

$$w_{nj} = \frac{P_{nj}}{\hbar \omega_{nj}}. \quad (4.63)$$

Собирая формулы (4.61)—(4.63), получаем

$$B_{jn} = \frac{2\pi^2 e^2 f_{jn}}{m\hbar\omega_{jn}}. \quad (4.64)$$

С учетом явного вида силы осциллятора (4.51) находим отсюда выражения для коэффициента Эйнштейна через матричный элемент дипольного момента перехода:

$$B_{jn} = \frac{4\pi^2 |\mathbf{d}_{jn}|^2}{3g_n\hbar^2}. \quad (4.65)$$

Формула для коэффициента Эйнштейна, описывающего вынужденное излучение, вытекает из (4.65), если воспользоваться равенством (4.12):

$$B_{nj} = \frac{4\pi^2 |\mathbf{d}_{nj}|^2}{3g_j\hbar^2}. \quad (4.66)$$

Заметим, что матричный элемент дипольного момента может считаться симметричным по своим индексам: $\mathbf{d}_{nj} = \mathbf{d}_{jn}$.

Отметим, что излагаемый подход справедлив, если внешнее поле не слишком сильное, когда амплитуда колебаний осциллятора перехода линейна по напряженности электрического поля в электромагнитной волне. В противном случае нужно учитывать нелинейные эффекты и требуется более сложное рассмотрение.

Заметим, что коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения можно представить в виде

$$A_{nj} = B_{nj} \rho_{\text{vac}}(\omega_{nj}), \quad (4.67)$$

где ρ_{vac} — величина, которую можно интерпретировать как спектральную плотность энергии вакуумных флуктуаций электромагнитного поля,

$$\rho_{\text{vac}}(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (4.68)$$

Запись (4.67)—(4.68) соответствует интерпретации спонтанного излучения как индуцированного вакуумными колебаниями.

4.5. СПЕКТРАЛЬНАЯ ФОРМА ЛИНИИ АТОМНОГО ПЕРЕХОДА

Соотношения (4.61)—(4.63) получены таким же образом, как формула (1.61) из гл. 1 в пределе излучения с широким спектром. В общем случае используя тот же подход, что и при выводе (4.70), с помощью (4.60) можно найти для поглощаемой на переходе $n \rightarrow j$ мощности следующее выражение:

$$P_{jn} = \frac{2\pi^2 e^2}{3m} f_{jn} \int_0^\infty G_{jn}^{(h)}(\omega') \rho(\omega') d\omega', \quad (4.69)$$

где $G_{jn}^{(h)}(\omega')$ — спектральная форма (профиль) линии рассматриваемого перехода в случае однородного уширения (homogeneous broadening),

$$G_{jn}^{(h)}(\omega') = \frac{(\delta_{jn}/\pi)}{(\omega_{jn} - \omega')^2 + (\delta_{jn})^2}. \quad (4.70)$$

Функция (4.70) называется лоренцевской функцией, или лоренцианом. Из (4.69) и (4.70) следует, что с наибольшей эффективностью поглощаются частоты внешнего поля вблизи собственной частоты перехода ω_{jn} , причем характерный частотный интервал, в котором взаимодействие между излучением и атомным переходом наиболее интенсивно, определяется константой затухания:

$$|\omega_{jn} - \omega'| \leq \delta_{jn}.$$

Отсюда следует, что ширина линии атомного перехода (с учетом обоих знаков отстройки) равна:

$$\Delta\omega_{jn}^{(h)} = 2\delta_{jn}.$$

Подставляя из последнего равенства константу затухания в соотношение (4.70), получаем стандартную запись для формы линии однородно-уширенного перехода в атоме или любой другой квантовой системе.

Вместо частотной характеристики однородного уширения, такой как спектральная ширина $\Delta\omega_{jn}^{(h)}$, можно ввести временную характеристику согласно равенству

$$T_2 = \frac{2}{\Delta\omega_{jn}^{(h)}}. \quad (4.71)$$

Параметр T_2 называется временем поперечной, или фазовой, релаксации. Он связан с константой затухания осциллятора перехода:

$$T_2 = \frac{1}{\delta_{jn}}$$

и поэтому, как это следует из уравнения (4.56), определяет время жизни осциллятора перехода в режиме свободных колебаний. Время T_2 по причинам, которые станут ясны из дальнейшего, называется также временем *необратимой* фазовой релаксации. Как ясно из сказанного, время поперечной релаксации связано с затуханием осциллятора, соответствующего переходу между уровнями энергии в квантовой системе.

Таким образом, с точки зрения принципа спектроскопического соответствия однородное уширение спектральной линии определяется затуханием осциллятора перехода, происходящим в режиме свободных колебаний, когда внешнее поле отсутствует.

Важным частным случаем однородного уширения является *естественное уширение* линии, обусловленное спонтанным излучением, когда

$$\Delta\omega_{jn}^{(h)} = A_{nj}.$$

В этом случае затухание осциллятора перехода вызвано взаимодействием атомного электрона с вакуумными флуктуациями электромагнитного поля. Естественное уширение для атома в свободном пространстве является минимально возможным, оно определяет принципиально достижимую степень монохроматичности излучения.

Другой тип уширения возникает при взаимодействии излучения с ансамблем атомов, когда существенен разброс собственных частот перехода $\Delta\omega_{jn}^{(inh)}$ в различных атомах. Этот разброс определяет *неоднородное уширение* линии (inhomogeneous broadening), спектральная форма которого дается гауссовой функцией (гауссианом):

$$G_{jn}^{(inh)}(\omega') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta\omega_{jn}^{(inh)}} \exp\left\{-\frac{(\omega' - \omega_{jn}^{(c)})^2}{2(\Delta\omega_{jn}^{(inh)})^2}\right\}, \quad (4.72)$$

где $\omega_{jn}^{(c)}$ — центральная частота перехода в ансамбле атомов.

Спектральные формы линии в случае однородного и неоднородного уширения представлены на рис. 4.2 для

$$\omega_{jn}^{(c)} = \omega_{jn} \quad \text{и} \quad \Delta\omega_{jn}^{(inh)} = \Delta\omega_{jn}^{(h)}.$$

Оси координат на графике этого рисунка отложены в относительных единицах.

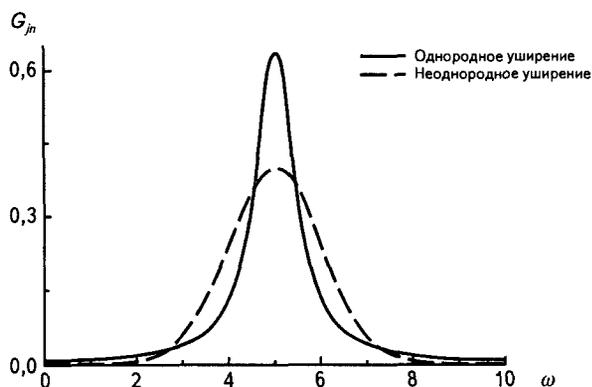


Рис. 4.2. Однородное и неоднородное уширение спектральной линии

Видно, что спектральная форма линии при однородном уширении обладает более широкими «крыльями», чем при неоднородном уширении. Общим свойством функций (4.70), (4.72) являются два факта:

- 1) нормировка на единицу;
- 2) обе зависимости переходят в дельта-функцию Дирака в пределе нулевой ширины.

К неоднородному уширению формы линии могут приводить различные причины в зависимости от конкретной реализации излучательного перехода. Для атомов в газе и ионов в плазме важным механизмом неоднородного уширения является эффект Доплера. В соответствии с этим эффектом частота излучения при переходе из собственной системы отсчета, связанной с атомом, в лабораторную систему отсчета изменяется по формуле

$$\omega = \gamma\omega_0 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right) \equiv \gamma\omega_0 \left(1 - \frac{v_k}{c} \right), \quad (4.73)$$

где ω_0 — частота в системе отсчета излучающего атома; γ — фактор Лоренца,

$$\gamma = \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right]^{-1/2};$$

θ — угол между вектором скорости атома и волновым вектором фотона (угол излучения); v_k — проекция скорости атома (иона) на направление излучения фотона. В газе и низкотемпературной плазме $v \ll c$ и $\gamma \cong 1$. Поскольку скорость атомов/ионов в состоянии теплового равновесия имеет разброс, ширина которого определяется тепловой скоростью

$$v_T = \sqrt{2 \frac{T}{M}}$$

(M — масса атома/иона), то в соответствии с формулой (4.73) частота излучения в лабораторной системе координат также будет иметь разброс. Доплеровский профиль можно определить через интеграл

$$G_{ki}^{(D)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta \left[\omega - \omega_{ki} \left(1 - \frac{v_k}{c} \right) \right] f(v_k) dv_k, \quad (4.74)$$

где $f(v_k)$ — функция распределения по проекции скорости атома (иона) на заданное направление. Дельта-функция в правой части равенства (4.74) выделяет те значения проекции скорости, при которых согласно эффекту Доплера (4.73) частота в лабораторной системе отсчета равна заданному значению ω . Формула (4.74) соответствует трактовке неоднородного уширения как функции распределения атомов по собственным частотам. Можно сказать, что эффект Доплера отображает распределение атомов по скоростям на их распределение по собственным частотам. Заметим, что использование второго равенства в правой части (4.73) существенно упрощает вывод выражения для доплеровского профиля.

В случае максвелловского распределения по скоростям, когда

$$f(v_k) = \frac{1}{\sqrt{\pi} v_T} \exp \left[- \left(\frac{v_k}{v_T} \right)^2 \right], \quad (4.75)$$

вычисление интеграла (4.74) дает

$$G_{ki}^{(D)}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta\omega_{ki}^{(D)}} \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_{ki})^2}{2(\Delta\omega_{ki}^{(D)})^2} \right], \quad (4.76)$$

где $\Delta\omega_{ki}^{(D)}$ — доплеровская ширина линии,

$$\Delta\omega_{ki}^{(D)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{v_T}{c} \omega_{ki} \equiv \sqrt{\frac{T}{M}} \frac{\omega_{ki}}{c}. \quad (4.77)$$

В правую часть равенства (4.77) входит температура, определяющая скорость поступательного движения атомов (ионов) плазмы, которая называется ионной температурой. Как видно из (4.77), измерение доплеровской ширины линии излучения с заданной центральной частотой дает возможность определить ионную температуру плазмы, если известна масса излучающего атома (иона). Доплеровская ширина линии согласно формуле (4.77) пропорциональна центральной частоте излучения, поэтому роль эффекта Доплера возрастает с увеличением энергии атомного перехода. Для оптического диапазона и комнатных температур доплеровское уширение составляет по порядку величины 10 ГГц.

Доплеровский профиль вида (4.76) получается в случае неизменной скорости атома в течение процесса излучения. Это условие реализуется, если длина свободного пробега атома/иона в газе или плазме больше длины волны излучения. Оно может быть нарушено в достаточно плотной и горячей плазме, такой, как плазма, порожденная лазерным излучением. Тогда профиль линии оказывается лоренцевским [см. (4.70)], а не гауссовым, с существенно меньшей шириной линии, обратно пропорциональной частоте атомных столкновений. В разреженной низкотемпературной плазме контур линии описывается формулой (4.76).

Другой механизм неоднородного уширения линии, характерный для атомов/ионов в плазме, связан с эффектом Штарка [5]. Эффект Штарка представляет собой сдвиг (и, вообще говоря, расщепление) спектральной линии излучения атома при воздействии на него внешнего электрического поля. Неоднородное уширение под влиянием эффекта Штарка возникает в случае статического (или достаточно медленно изменяющегося во времени) электрического поля. Такие поля создаются ионами плазмы в силу относительно малой по срав-

нению с электронами скорости их движения (из-за большой массы ионов). Выражение для линейного по электрическому полю эффекта Штарка имеет вид

$$\omega - \omega_{ik} = C_{ik} F, \quad (4.78)$$

где F — модуль напряженности электрического поля в месте расположения атома (иона); C_{ik} — штарковская постоянная для рассматриваемого перехода в атоме $k \rightarrow i$. Линейный эффект Штарка характерен для водородоподобного иона, когда присутствует вырождение по орбитальному квантовому числу.

Рассмотрим влияние эффекта Штарка на форму спектральной линии в статическом случае, когда электрическое поле, действующее на излучающий атом, создается большим количеством ионов плазмы. Тогда для напряженности суммарного электрического поля имеем

$$\mathbf{F} = \sum_{j=1}^{N_0} \mathbf{F}_j = \sum_{j=1}^{N_0} e \frac{\mathbf{r}_j}{r_j^3}, \quad (4.79)$$

где суммирование производится по всем ионам плазмы, число которых предполагается равным N_0 . Для простоты в (4.79) положим $Z = 1$. Соотношение (4.78) устанавливает однозначное соответствие между электрическим полем и сдвигом частоты. Поэтому если известна функция распределения для напряженности электрического поля $W(F)$, то с помощью формулы (4.78) легко найти функцию распределения по частотам, которая и является профилем линии при неоднородном уширении. Эта функция имеет вид

$$G_{ik}^{(St)}(\omega) = \frac{1}{C_{ik}} W\left(\frac{\omega - \omega_{ik}}{C_{ik}}\right). \quad (4.80)$$

Множитель перед функцией распределения ионного поля возник из соотношения

$$\frac{dF}{d\omega} = \frac{1}{C_{ik}},$$

которое появляется при переходе от распределения по полю к распределению по частоте.

Таким образом, ключевым является вопрос определения функции распределения ионного поля $W(F)$. Найдем ее, следуя Хольц-

марку, в приближении отсутствия корреляции между ионами плазмы. Тогда вероятность ионов иметь радиус-вектор в интервале значений $(r_j, r_j + dr_j)$ пропорциональна произведению

$$V^{-N_0} \prod_{j=1}^{N_0} dr_j,$$

где V — объем плазмы. Вероятность $W(F)$ пропорциональна той части N_0 -мерного пространства в переменных r_j , в которой выполняется равенство (4.79). В соответствии с этим для функции распределения ионного поля справедлива формула

$$W(F) = \left\langle \delta \left(F - \sum_{j=1}^{N_0} e \frac{r_j}{r_j^3} \right) \right\rangle, \quad (4.81)$$

где усреднение проводится по распределению ионных радиусов, о котором говорилось выше. Явный вид функции $W(F)$ можно получить, воспользовавшись интегральным представлением дельта-функции и переходя к пределу $N_0, V \rightarrow \infty$ при постоянной концентрации ионов $N = N_0/V$. В результате получается следующее выражение:

$$W(F) dF = W(F) dF = H \left(\frac{F}{F_0} \right) \frac{dF}{F_0}, \quad (4.82)$$

где $H(\beta)$ — распределение Хольцмарка,

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^{\infty} x \sin(\beta x) \exp(-x^{3/2}) dx; \quad (4.83)$$

$$\beta = \frac{F}{F_0};$$

$F_0 = \lambda e N^{2/3}$ — масштабный коэффициент размерности напряженности электрического поля, $\lambda = 2\pi(4/15^{2/3}) \cong 2,603$. Из равенств (4.82) следует, что распределение ионного поля зависит только от модуля напряженности. График функции Хольцмарка представлен на рис. 4.3. Максимуму этой функций соответствует значение $\beta = 1,607$.

Функция Хольцмарка нормирована условием

$$\int_0^{\infty} H(\beta) d\beta = 1.$$

Вблизи нуля $H(\beta)$ возрастает как β^2 , а при $\beta \gg 1$ уменьшается как $\beta^{-5/2}$.

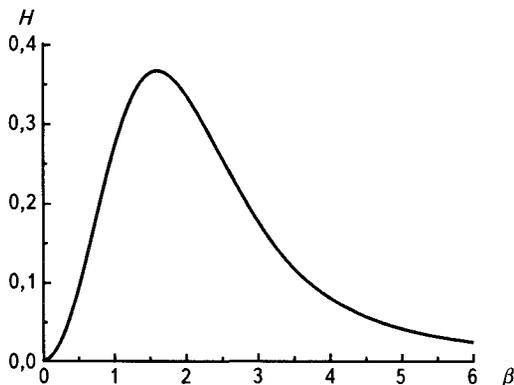


Рис. 4.3. Функция Хольцмарка

Распределение Хольцмарка существенно отличается от гауссова распределения (4.72), которое описывает уширение спектральной линии из-за эффекта Доплера. Оно близко к нему только при малых $\beta = 1$, когда вклад в поле дает большое количество ионов. Как известно, статистические закономерности в ансамблях частиц как раз и описываются распределением Гаусса. При сильных полях распределение Хольцмарка совпадает с распределением поля от одной ближайшей частицы (бинарное приближение). Таким образом, функция Хольцмарка описывает переход от гауссова распределения при слабых полях к бинарному распределению сильных полей. Любопытно отметить, что масштаб хольцмарковского распределения $F_0 = 2,603eN^{2/3}$ менее чем на один процент отличается от поля на среднем межиионном расстоянии

$$\bar{F} = e \left(\frac{4\pi N}{3} \right)^{2/3} \approx 2,61eN^{2/3}.$$

В плазме сбой фазы осциллятора перехода (эквивалентного осциллятора), приводящий к однородному уширению, может происходить в результате столкновения атома с заряженными частицами. Рассмотрим этот процесс в случае взаимодействия электронов с водородоподобным атомом. Тогда мгновенное изменение частоты ос-

циллятора $\kappa(t)$ под действием электрического поля $F(t)$ плазменного электрона можно представить в виде

$$\kappa(t) = \frac{C}{e} F(t), \quad (4.84)$$

где C — штарковская постоянная. Сбой фазы эквивалентного осциллятора за все время пролета электрона вблизи атома (иона) равен

$$\Delta\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C}{\rho^2 + v^2 t^2} dt = \pi \frac{C}{\rho v}, \quad (4.85)$$

где ρ — прицельный параметр; v — скорость возмущающей частицы, которая предполагается двигающейся равномерно и прямолинейно. Из формулы (4.85) следует, что сбой фазы $\Delta\varphi = \pi$ достигается при

$$\rho_w = \frac{C}{v}. \quad (4.86)$$

Данная величина называется радиусом Вайскопфа; она определяет область прицельных параметров, соответствующих существенному сбою фазы эквивалентного осциллятора. С радиусом ρ_w связаны сечение Вайскопфа:

$$\sigma_w = \pi \rho_w^2 = \pi \frac{C^2}{v^2} \quad (4.87)$$

и частота Вайскопфа:

$$\Omega = \frac{v}{\rho_w} = \frac{v^2}{C}. \quad (4.88)$$

Параметр ρ_w определяет эффективный объем взаимодействия атома с возмущающими частицами. Если в этом объеме находится одна частица, то имеет место бинарное взаимодействие. В противном случае с атомом одновременно взаимодействуют много частиц (небинарность).

Частота Вайскопфа (4.88) разделяет ударный и статический предел в функции формы спектральной линии. Профиль линии, уширенной столкновениями с электронами, может быть представлен в виде

$$G(\Delta\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta\omega(\omega - \omega_{ik})}{(\omega - \omega_{ik})^2 + [\Delta\omega(\omega - \omega_{ik})/2]^2}, \quad (4.89)$$

который совпал бы с лоренцевским контуром (4.70), если бы ширина линии $\Delta\omega$ в числителе правой части равенства (4.89) была бы постоянной величиной (как в знаменателе). В действительности, в числителе ширина линии зависит от отстройки частоты. Если эта отстройка существенно меньше (по модулю) частоты Вайскопфа (ударный предел), то можно считать $\Delta\omega(\omega - \omega_{ik}) = \Delta\omega(\omega = \omega_{ik})$ и реализуется лоренцевский профиль линии (4.70). В ударном случае взаимодействие квантовой системы с возмущающей частицей носит мгновенный характер. В результате фаза колебания осциллятора перехода изменяется «скачком». Типичная величина ударного уширения в газе при нормальном давлении и комнатной температуре составляет порядка 100 ГГц, так что в оптическом диапазоне оно намного превосходит естественное уширение линии, характерное значение которого 100 МГц.

В противоположном случае $|\omega - \omega_{ik}| \gg \Omega$ (далекое крыло линии) в формуле (4.89) необходимо учитывать зависимость ширины линии от частоты. Тогда реализуется статическое уширение, и профиль линии (в бинарном приближении) имеет вид

$$G_{ik}^{(st)}(\omega) = \frac{2\pi NC^{3/2}}{|\omega - \omega_{ik}|^{5/2}}. \quad (4.90)$$

Зависимость от частотной отстройки в правой части равенства (4.90) совпадает с результатом приближения Хольцмарка в пределе сильных полей, когда $H(\beta \gg 1) \propto \beta^{-5/2}$. Как уже отмечалось, это совпадение связано с тем, что в пределе сильных полей статическое распределение Хольцмарка совпадает с распределением поля от одной ближайшей к атому частицы, т. е. реализуется бинарное приближение.

Условие $|\omega - \omega_{ik}| \gg \Omega$ означает, что в статическом пределе время взаимодействия (ρ_w/v) должно быть существенно больше времени формирования спектральной линии ($\approx 1/|\omega - \omega_{kn}|$). В ударном пределе, напротив, время формирования линии велико, и возмущение можно считать мгновенным.

Выражение для формы линии в статическом пределе и бинарном приближении (4.90) получено для заряд-дипольного уширяющего взаимодействия. В общем случае, когда энергия взаимодействия уширяющих частиц с атомом (ионом) имеет вид

$$U(R) = \frac{C_n}{R^n}$$

(R — расстояние между частицами), профиль линии в статическом пределе описывается выражением

$$G_{ik}^{(st)}(\omega) = \frac{4\pi N (C_n/\hbar)^{3/n}}{n|\omega - \omega_{ik}|^{(n+3)/n}}. \quad (4.91)$$

Полученное выражение справедливо в спектральном диапазоне $|\omega - \omega_{ik}| \gg \Omega$. Из формулы (4.91) следует, что частотная зависимость в статическом крыле линии совпадает с лоренцевской (4.70) только для $n = 3$, т. е. для диполь-дипольного взаимодействия.

4.6. СЕЧЕНИЕ РАДИАЦИОННОГО ПЕРЕХОДА

Для вычисления вероятности в единицу времени (скорости) фотоперехода между атомными уровнями энергии наряду с коэффициентом Эйнштейна для вынужденного процесса (4.62) широко используется сечение радиационного перехода, которое в монохроматическом поле частоты ω определяется равенством

$$\sigma_{jn}(\omega) = \frac{w_{jn}}{j(\omega)}, \quad (4.92)$$

где $j(\omega)$ — плотность потока фотонов на заданной частоте:

$$j(\omega) = \frac{cE_0^2}{8\pi\hbar\omega}, \quad (4.93)$$

E_0 — амплитуда напряженности электрического поля в монохроматическом излучении. Поскольку размерность вероятности в единицу времени — обратная секунда, а плотности потока фотонов — произведение обратного времени на обратную площадь, из определения (4.92) следует, что сечение имеет размерность площади. Таким образом, можно сказать, что сечение описывает некую эффективную площадь вокруг атома, попадая в которую фотон вызывает переход между уровнями энергии атома с единичной вероятностью.

Используя формулы (4.61), (4.63), из (4.92) и (4.93) находим для сечения перехода $n \rightarrow j$ следующее выражение:

$$\sigma_{jn}(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} f_{jn} G_{jn}^{(h)}(\omega), \quad (4.94)$$

где $G_{jn}^{(h)}(\omega)$ — спектральная форма линии однородно уширенного перехода (4.70); f_{jn} — сила осциллятора перехода (4.51); g_n — статистический вес (фактор вырождения) n -го энергетического уровня атома.

Из выражения (4.94), в частности, следует, что сечение перехода тем больше, чем больше соответствующая сила осциллятора. Для дипольно-запрещенных переходов, когда $f_{jn} = 0$, сечение тоже равно нулю.

Подставляя выражение для силы осциллятора (4.51) в равенство (4.94), получаем выражение для сечения фотоперехода через матричный элемент дипольного момента d_{jn} :

$$\sigma_{jn}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega_{jn}}{3\hbar c g_n} |\langle n | \mathbf{d} | j \rangle|^2 G_{jn}^{(h)}(\omega), \quad (4.95)$$

Максимальное значение сечения отвечает частоте $\omega = \omega_{jn}$ (резонансное условие) и равно:

$$\sigma_{jn}^{(\max)} = \sigma_{jn}(\omega = \omega_{jn}) = \frac{8\pi}{3\hbar c g_n} |\langle n | \mathbf{d} | j \rangle|^2 \frac{\omega_{jn}}{\Delta\omega_{jn}}, \quad (4.96)$$

т. е. пропорционально отношению собственной частоты к спектральной ширине линии атомного перехода. Это отношение аналогично добротности резонатора и равно числу свободных колебаний осциллятора до их полного затухания. Отметим, что в ранних работах М. Планка и А. Эйнштейна по квантовой теории электромагнитного взаимодействия атомы и молекулы вещества назывались резонаторами.

В случае естественного уширения, когда $\Delta\omega_{jn} = A_{nj}$, равенство (4.96) с учетом выражения для коэффициента Эйнштейна для спонтанного излучения (4.59) преобразуется к виду:

$$\sigma_{jn}^{(\max)} = \frac{g_j}{2\pi g_n} \lambda_{jn}^2. \quad (4.97)$$

Отсюда следует, что резонансное сечение фотоперехода при естественном уширении линии пропорционально квадрату резонансной длины волны

$$\lambda_{jn} = \frac{2\pi c}{\omega_{jn}},$$



т. е. в широком спектральном диапазоне на много порядков величины превосходит геометрическое сечение атома, равное его площади. Отметим, что в рассматриваемом случае из выражения для максимального сечения исчез матричный элемент дипольного момента.

При воздействии на атом излучения с конечной спектральной шириной $\Delta\omega \neq 0$ вероятность в единицу времени возбуждения атомного перехода $n \rightarrow j$ дается интегралом:

$$w_{jn} = \int \sigma_{jn}(\omega') j(\omega') d\omega'. \quad (4.98)$$

Если спектр излучения существенно превосходит спектральную ширину линии перехода $\Delta\omega \gg \Delta\omega_{jn}$, как это имеет место, например, в случае теплового излучения, то спектральную форму линии перехода в определении сечения можно заменить на дельта-функцию

$$G_{jn}^{(h)}(\omega') \rightarrow \delta(\omega' - \omega_{jn})$$

и интеграл (4.98) дает:

$$w_{jn} = \frac{4\pi^2 \omega_{jn}}{3\hbar c g_n} |\langle n | \mathbf{d} | j \rangle|^2 j(\omega_{jn}) = B_{jn} \rho(\omega_{jn}), \quad (4.99)$$

поскольку

$$j(\omega) = \frac{c\rho(\omega)}{\hbar\omega},$$

$\rho(\omega)$ — спектральная плотность излучения. Второе равенство в формуле (4.99) совпадает с соотношением (4.3), которое использовал А. Эйнштейн при описании взаимодействия теплового излучения с двухуровневой системой.

В общем случае произвольного соотношения между ширинами спектров излучения и перехода в атоме для вычисления скорости фотовозбуждения надо использовать выражение (4.98).

Заметим, что для расчета вероятности в единицу времени фотоперехода вместо сечения иногда используется понятие спектрального коэффициента Эйнштейна, который по определению равен:

$$D_{jn}(\omega) = B_{jn} G_{jn}(\omega). \quad (4.100)$$

Формула (4.98) переписывается через спектральный коэффициент Эйнштейна с заменой плотности потока фотонов $j(\omega)$ на спектральную плотность энергии излучения $\rho(\omega)$.

Удобство понятия сечения помимо прочего связано с его размерностью площади, позволяющей дать наглядную геометрическую интерпретацию процессу взаимодействия излучения с атомом. Размерность спектрального коэффициента Эйнштейна не столь проста, поэтому наглядная интерпретация фотон-атомного взаимодействия отсутствует.

Переход в атоме $n \rightarrow j$ под действием излучения, когда $E_n < E_j$, отвечает поглощению фотона. Обратный переход $j \rightarrow n$ соответствует излучению фотона, которое может быть как вынужденным (под действием внешнего поля), так и спонтанным (самопроизвольным). Сечение вынужденного излучения $\sigma_{nj}(\omega)$ на переходе $j \rightarrow n$ описывается формулами, аналогичными (4.94) и (4.95). Если учесть, что матричный элемент дипольного момента выбором волновых функций может быть сделан симметричным

$$\langle n | \mathbf{d} | j \rangle = \langle j | \mathbf{d} | n \rangle \quad \text{и} \quad G_{jn}^{(h)}(\omega) = G_{nj}^{(h)}(\omega),$$

то разница в выражениях для сечения вынужденного излучения и поглощения будет заключаться только в различных статистических весах состояний. Итак, для того, чтобы получить выражение для сечения вынужденного излучения $\sigma_{nj}(\omega)$ на переходе $j \rightarrow n$, нужно в формуле (4.95) произвести замену: $g_n \rightarrow g_j$.

Через сечение поглощения легко выразить коэффициент поглощения k_{jn} , описывающий затухание электромагнитной волны при распространении в среде с резонансными атомами в результате перехода атома из состояния с меньшей энергией в состояние с большей энергией $n \rightarrow j$ ($E_n < E_j$): $k_{jn} = N_n \sigma_{jn}$, где N_n — концентрация атомов в n -м состоянии. Очевидно, что коэффициент поглощения имеет размерность обратной длины. Аналогично коэффициенту поглощения можно ввести коэффициент усиления на обратном переходе $j \rightarrow n$, отвечающем излучению вынужденного фотона и увеличению интенсивности излучения: $k_{nj} = N_j \sigma_{nj}$. Суммарный коэффициент усиления излучения, учитывающий вынужденное излучение и поглощение на рассматриваемом атомном переходе, равен (см. разд. 4.7):

$$k_{nj}^{(\text{tot})} = k_{nj} - k_{jn} = g_j \sigma_{nj}(\omega) \left\{ \frac{N_j}{g_j} - \frac{N_n}{g_n} \right\}. \quad (4.101)$$



Понятно, что если $k_{nj}^{(\text{tot})} > 0$ — доминирует вынужденное излучение — излучение усиливается средой резонансных атомов. В противоположном случае происходит ослабление излучения, так как преобладает поглощение фотонов над вынужденным излучением. Поскольку сечение атомного перехода величина положительная, то, как следует из формулы (4.101), для усиления излучения необходимо выполнение неравенства:

$$\frac{N_j}{g_j} - \frac{N_n}{g_n} > 0 \quad \text{при} \quad E_n < E_j. \quad (4.102)$$

Соотношение (4.102) называется условием *инверсии населенностей*. Оно широко используется в квантовой электронике, лазерной физике и смежных областях при исследовании возможности усиления излучения. В состоянии термодинамического равновесия, когда работает формула Больцмана для населенностей энергетических уровней (4.4), выполняется неравенство, обратное (4.102). Таким образом, для создания инверсии населенностей необходимо вывести вещество из состояния теплового равновесия, что достигается внешним воздействием на среду, называемым накачкой.

Понятие сечения используется не только для описания поглощения и вынужденного излучения, оно характеризует и другие фотоиндуцированные процессы, такие как рассеяние фотонов, фоторекомбинация, тормозное излучение и т. д. Кроме того, концепция сечения используется при расчетах взаимодействия других элементарных частиц с атомами и молекулами: электронов, протонов, нейтронов. Во всех перечисленных случаях сечение определяется формулой, аналогичной (4.92), с заменой плотности потока фотонов на плотность потока частиц, вызывающих рассматриваемый процесс.

В заключении этого раздела отметим, что понятие вероятности фотоиндуцированного процесса в единицу времени теряет физический смысл в случае сверхкоротких электромагнитных импульсов, когда длительность излучения порядка периода колебания электрического поля на несущей частоте. Сверхкороткие импульсы могут быть получены с помощью специальных методов временного сжатия лазерного излучения. В оптическом диапазоне сверхкоротким импульсам отвечает длительность в несколько фемтосекунд. В настоящее время в видимом диапазоне длин волн

экспериментально получены лазерные импульсы хорошо контролируемой формы, длительность которых составляет полтора периода на оптической частоте. В ультрафиолетовом диапазоне минимальные значения длительностей составляют несколько сотен аттосекунд.

При рассмотрении взаимодействия сверхкоротких импульсов излучения с веществом более адекватным становится понятие полной вероятности процесса за все время действия импульса, которая может быть выражена через сечение рассматриваемого явления. Данный вопрос подробно рассматривается в дальнейшем.

4.7. БАЛАНСНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИКА ЛАЗЕРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ

В начале этой главы рассматривалось взаимодействие теплового излучения с двухуровневой системой (ДС), как это было впервые сделано А. Эйнштейном в 1916 г. [1]. Особенность проведенного анализа заключалась в том, что предполагалось наличие термодинамического равновесия между веществом и излучением, которое определяло населенность атомных уровней и форму спектра излучения. Для практических приложений, в частности для описания процесса лазерной генерации, необходима другая постановка задачи, в которой предположение о равновесии отсутствует. Наиболее простой подход, позволяющий описать характеристические черты взаимодействия ДС с излучением, базируется на использовании балансных (или скоростных) уравнений.

Вывод балансных уравнений

Как следует из (4.92), для скорости вынужденного излучательного перехода под действием монохроматического излучения на частоте ω справедливо выражение (в этом разделе для краткости опускаем индексы состояний)

$$w = \sigma(\omega)cn_{\text{ph}}, \quad (4.103)$$

где $\sigma(\omega)$ — радиационное сечение; n_{ph} — концентрация фотонов; c — скорость света. При записи формулы (4.103) из соотношения (4.92) было использовано равенство $j(\omega) = cn_{\text{ph}}$.

Число излучательных переходов в единицу времени и в единице объема с нижнего уровня 1 двухуровневой системы на верхний уровень 2 равно:

$$\dot{N}\uparrow = wN_1.$$

Аналогично, число переходов с верхнего уровня на нижний уровень равно:

$$\dot{N}\downarrow = wN_2.$$

Отсюда для скорости изменения инверсии населенностей в двухуровневой системе $N = N_2 - N_1$ имеем

$$\dot{N} = 2\sigma cn_{\text{ph}} N.$$

Здесь учтено, что один переход приводит к удвоенному изменению инверсии. Это равенство получено без учета взаимодействия ДС с окружением. Если учесть такое взаимодействие, можно получить *первое балансное уравнение* на инверсию населенностей в ДС:

$$\dot{N} + \frac{N - N_e}{T_1} = -2\sigma cn_{\text{ph}} N, \quad (4.104)$$

где T_1 — время релаксации инверсии населенности; N_e — равновесное значение населенности в отсутствии излучения. Время T_1 называется также временем *продольной* релаксации, оно определяет время жизни энергетических уровней. Как правило, время продольной релаксации меньше времени поперечной релаксации. Исключением является случай, когда и та и другая релаксация обусловлена спонтанным излучением, тогда $T_2 = 2T_1$. Уширение, вызванное спонтанным излучением, называется *естественным*.

Если в качестве двухуровневой системы рассмотреть рабочий переход в лазере на алюмоиттриевом гранате с неодимом (YAG:Nd³⁺), на котором генерируется излучение с длиной волны 1064 нм, то соответствующее время продольной релаксации равно: $T_1 \cong 250$ мкс. В данном случае время релаксации инверсии населенностей совпадает с временем жизни верхнего рабочего уровня 2 (который имеет спектроскопическое обозначение ${}^4F_{3/2}$), поскольку населенность нижнего рабочего уровня 1 пренебрежимо мала. (С верхнего рабочего уровня происходят вынужденные переходы, приводящие к усилению излучения.) Это весьма большое (по атомным меркам) время

жизни, обусловленное тем обстоятельством, что излучательные переходы с данного уровня на нижележащие уровни для свободного иона неодима запрещены дипольными правилами отбора. Этот запрет частично снимается при помещении иона Nd^{3+} в кристаллическую решетку алюмоиттриевого граната, представляющего собой ионный кристалл $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$. Но поскольку влияние кристаллического поля решетки на оптически активные $4f$ электроны неодима мало, то запрет в значительной мере действует, и вероятность излучательной релаксации мала. Вероятность безызлучательной релаксации тоже мала в силу специфики расположения верхнего рабочего уровня ${}^4F_{3/2}$. Вышеприведенными обстоятельствами определяется аномально большое время жизни состояния ${}^4F_{3/2}$ иона неодима в алюмоиттриевом гранате.

Энергетические уровни, обладающие аномально большим временем жизни, называются *метастабильными* уровнями. Они играют важную роль в создании инверсной населенности, необходимой для усиления излучения.

Рассмотрим сначала решение уравнения (4.104) в отсутствие резонансного излучения ($n_{\text{ph}} = 0$). Отметим, что помимо резонансных фотонов внешнего поля на ДС могут воздействовать фотоны накачки (см. ниже). Тогда зависимость инверсии населенностей двухуровневой системы от времени имеет вид

$$N(t) = N_e + [N(0) - N_e] \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right),$$

где $N(0)$ — инверсия в начальный момент времени. Отсюда следует, что инверсия населенностей в отсутствие излучения под влиянием термостата релаксирует с характерным временем T_1 к своему равновесному значению N_e . Таким образом, становится ясен физический смысл второго слагаемого в левой части равенства (4.104).

Равновесное значение инверсии населенностей может быть двух типов: термодинамически равновесное значение N_{eT} и равновесное значение, учитывающее *накачку* верхнего рабочего уровня. Накачка представляет собой внешнее воздействие на активную среду лазера, приводящее к созданию инверсии населенностей на рабочем переходе. (Активная среда — среда, в которой происходит усиление излучения.) Для твердотельных лазеров обычно используется оптическая накачка, включая накачку при помощи излучения другого лазе-



ра. В газовых лазерах роль накачки играют столкновения с заряженными и нейтральными частицами. Существуют и другие типы накачки, зависящие от специфики работы лазера.

Термодинамически равновесное значение инверсии N_{eT} всегда отрицательно, поскольку отношение населенностей в этом случае подчиняется формуле Больцмана

$$\frac{N_{2T}}{N_{1T}} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left[-\frac{E_2 - E_1}{T}\right] \quad \text{и} \quad N_{2T} < N_{1T},$$

где T — температура в энергетических единицах. Накачка приводит к созданию положительной инверсной населенности, необходимой для усиления излучения. В присутствии накачки равновесное значение инверсии населенностей можно представить в виде

$$N_e = N_{eT} + w_p T_1,$$

где w_p — скорость накачки на единицу объема.

Если резонансное излучение создано внешним источником и на него слабо влияет взаимодействие с рассматриваемым переходом (*приближение заданного поля*), то для описания эволюции ДС достаточно первого балансного уравнения (4.104). В случае постоянной интенсивности резонансного излучения, когда $n_{ph} = \text{const}$, из уравнения (4.104) легко найти следующее стационарное решение для инверсии населенностей:

$$N_{st} = \frac{N_e}{1 + 2wT_1}, \quad (4.105)$$

где $w = \sigma c n_{ph}$ — скорость вынужденного излучательного перехода. Величина $s = 2wT_1$ называется параметром насыщения. При выводе равенства (4.105) из уравнения (4.104) было учтено условие стационарности $\dot{N} = 0$. Из полученного выражения следует, что с ростом интенсивности излучения в пределе $w \gg 1/T_1$ стационарное значение инверсии населенностей ДС стремится к нулю: $N_{st} \rightarrow 0$. В этом проявляется *эффект насыщения*. Эффект насыщения возникает, когда скорость вынужденных переходов под действием внешнего резонансного поля существенно превышает скорость спонтанных переходов под действием термостата, которая обратно пропорциональна времени продольной релаксации $w_{sp} \approx 1/T_1$.

Одним из следствий эффекта насыщения является невозможность в стационарном режиме получить положительную инверсию населенностей в двухуровневой системе. Интенсивность резонансного излучения, при которой достигается равенство: $w = 1/2T_1$, называется *интенсивностью насыщения*, для нее можно получить выражение:

$$I_{\text{sat}} = \frac{\hbar\omega_0}{2\sigma T_1}.$$

Оценим эту величину для лазерного перехода в алюмоиттриевом гранате с неодимом (YAG:Nd³⁺), на котором генерируется излучение с длиной волны 1064 нм. Верхним энергетическим уровнем рабочего перехода является метастабильный уровень иона неодима Nd³⁺, имеющий спектроскопическое обозначение ⁴F_{3/2}. Нижний рабочий уровень — один из подуровней штарковского мультиплета, образованного из термина ⁴I_{11/2} свободного иона неодима под действием электрического поля кристаллической решетки. Энергия резонансного фотона, излучаемого/поглощаемого на рассматриваемом переходе, равна: $\hbar\omega_0 = 1,17$ эВ ($1,87 \cdot 10^{-19}$ Дж), сечение перехода в максимуме спектральной зависимости равно $\sigma(\omega_0) = 7 \cdot 10^{-19}$ см², время продольной релаксации $T_1 \approx 250$ мкс. С помощью этих значений по вышеприведенной формуле для интенсивности насыщения рассматриваемого лазерного перехода находим: $I_{\text{sat}}(^4I_{11/2} \rightarrow ^4F_{3/2}) = 530$ Вт/см². Для меньших времен продольной релаксации, характерных для дипольно-разрешенных переходов, интенсивность насыщения будет, естественно, выше.

Получим теперь второе балансное уравнение, описывающее изменение во времени концентрации фотонов n_{ph} за счет взаимодействия резонансного излучения с двухуровневой системой. Двухуровневая система в данном случае соответствует рабочему переходу между уровнями энергии в активных центрах (атомах, ионах, молекулах). Рассмотрим электромагнитное поле в *открытом резонаторе*, т. е. резонаторе, образованном совокупностью зеркал, в котором могут существовать слабозатухающие колебания электромагнитного поля, как правило, оптического и близлежащих диапазонов частот. Эти колебания называются собственными модами резонатора. Одно из зеркал открытого резонатора обычно является полупрозрачным, через него излучение может выводиться наружу, с чем связаны так называемые полезные потери. В резонаторе имеются также и пара-



зитные потери, которые уменьшают концентрацию фотонов. Все это приводит к конечному времени жизни фотона в резонаторе, которое мы будем обозначать буквой τ_c . Характерное значение времени жизни в лазерных резонаторах составляет $10^{-8} - 10^{-9}$ с в зависимости от типа генерации. В непрерывном режиме генерации время жизни фотона больше, чем в импульсном. Помимо потерь в резонаторе, концентрация фотонов уменьшается в результате переходов снизу вверх (по энергии) между энергетическими уровнями ДС, т. е. за счет поглощения резонансного излучения на рабочем переходе. Рост концентрации фотонов возникает за счет вынужденного излучения, обусловленного излучательными переходами сверху вниз в двухуровневой системе. Указанные процессы суммируются следующим уравнением для концентрации фотонов резонансного поля [6]:

$$\dot{n}_{\text{ph}} + \frac{n_{\text{ph}}}{\tau_c} = \sigma c n_{\text{ph}} N. \quad (4.106)$$

Это и есть *второе балансное уравнение*, описывающее изменение во времени интенсивности излучения $I = c n_{\text{ph}} \hbar \omega$. Второе слагаемое в левой части равенства (4.106) описывает потери энергии электромагнитного поля в резонаторе, а правая часть этого уравнения отвечает изменению концентрации фотонов за счет взаимодействия с ДС, представляющей рабочий переход. Если населенность нижнего уровня ДС больше, чем населенность верхнего уровня $N_1 > N_2$, тогда инверсия отрицательна $N < 0$, и взаимодействие фотонов с рабочим переходом приводит к уменьшению их концентрации. В этом случае преобладает поглощение резонансных фотонов над их вынужденным излучением. Когда населенности энергетических уровней равны между собой и инверсия нулевая, правая часть уравнения (4.106) тоже равна нулю. В этом случае нет взаимодействия между резонансным излучением и ДС и концентрация фотонов уменьшается по экспоненциальному закону с константой времени τ_c :

$$n_{\text{ph}}(t) = n_{\text{ph}}(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right).$$

Наконец, при положительной инверсии $N > 0$ вынужденное излучение фотонов доминирует над поглощением, и возникает усиление излучения на рабочем переходе. Таким образом, условием усиления излучения при взаимодействии с двухуровневой системой яв-

ляется положительность инверсии населенностей. Этот критерий в общем виде (с учетом факторов вырождения энергетических уровней) записывается в виде неравенства:

$$\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1} > 0. \quad (4.107)$$

Система уравнений (4.104) и (4.106) описывает электрон-фотонное взаимодействие в рамках простейшей модели. Этой модели, однако, достаточно, чтобы выявить и количественно описать основные качественные моменты лазерной генерации.

Стационарное решение: порог генерации, коэффициент усиления

Простейшее решение система балансных уравнений (4.104), (4.106) имеет в стационарном режиме работы лазера, когда производные по времени от инверсии населенностей и концентрации фотонов можно положить равными нулю. Тогда система дифференциальных уравнений превращается в систему алгебраических уравнений, решение которой имеет вид:

$$N_{st} = \frac{1}{\sigma c \tau_c}; \quad (4.108)$$

$$(n_{ph})_{st} = \frac{\tau_c}{2T_1} (N_e - N_{st}). \quad (4.109)$$

Как видно из последнего равенства, имеющие физический смысл положительные значения стационарной концентрации фотонов реализуются в случае

$$N_e > N_{st} = \frac{1}{\sigma c \tau_c}.$$

Таким образом, стационарное значение инверсии населенностей (4.108) оказывается еще и пороговым значением:

$$N_{th} = N_{st} = \frac{1}{\sigma c \tau_c}.$$

Это означает, что для возникновения лазерной генерации в стационарном режиме $[(n_{ph})_{st} > 0]$ необходимо достижение равновесного



значения инверсии населенностей, такого что $N_e > N_{th}$. Выполнение последнего неравенства обеспечивается накачкой, поскольку $N_e = N_{eT} + w_p T_1$ (w_p — скорость накачки). Отсюда получаем выражение для порогового значения скорости накачки на единицу объема:

$$(w_p)_{th} = \frac{1}{T_1 \sigma c \tau_c} + \frac{|N_{eT}|}{T_1}. \quad (4.110)$$

При записи этой формулы учтено, что инверсия населенностей в состоянии термодинамического равновесия отрицательна: $N_{eT} = -|N_{eT}|$. Из полученного выражения следует, что пороговая накачка, вообще говоря, расходуется по двум каналам, соответствующим двум слагаемым в правой части равенства (4.110). Первое из них отвечает необходимости покрытия потерь энергии электромагнитного поля в резонаторе, включая полезные потери. Второе слагаемое описывает преодоление т.н. теплового барьера. Преодоление теплового барьера подразумевает предварительное выравнивание населенностей рабочих уровней для того, чтобы на рабочем переходе происходило усиление излучения, а не его поглощение. В случае, когда лазер работает по четырехуровневой схеме, термодинамически равновесной инверсией населенностей можно пренебречь, т. е. положить $N_{eT} = 0$. Данная ситуация имеет место, если нижний рабочий уровень лазерного перехода отвечает возбужденному состоянию оптического электрона, причем энергия его возбуждения больше температуры (в энергетических единицах). Оптическими называются электроны, энергия возбуждения которых относится к видимому и близлежащим спектральным диапазонам. При комнатной температуре имеем: $T \cong 0,025$ эВ, поэтому для реализации четырехуровневой схемы необходимо, чтобы энергия нижнего рабочего уровня, отсчитанная от основного состояния атома, была существенно больше 0,025 эВ. Данная ситуация как раз характерна для лазера на алюмоиттриевом гранате с неодимом, когда $E_1 - E_0 \cong 0,25$ эВ $\gg T$.

Таким образом, для лазеров, работающих по четырехуровневой схеме в выражении для пороговой скорости накачки (4.110), остается только первое слагаемое в правой части равенства, отвечающее за компенсацию потерь энергии излучения в резонаторе.

Сравнение выражений (4.109) и (4.110) говорит о том, что роль параметра T_1 неоднозначна. С одной стороны, с ростом времени продольной релаксации уменьшается пороговое значение скорости накачки, что облегчает осуществление режима генерации лазера.

С другой стороны, большое время T_1 соответствует малой концентрации фотонов в стационарном режиме (4.109). Что касается времени жизни фотона в резонаторе τ_c , то из формул (4.108)—(4.110) следует, что большее значение этого параметра уменьшает пороговые величины и увеличивает энергию поля в резонаторе. Однако следует иметь в виду, что слишком большие значения τ_c уменьшают полезные потери, т. е. энергию излучения на выходе из резонатора. Таким образом, существует оптимальное с точки зрения максимального выхода излучения значение времени жизни фотона в резонаторе.

Сделаем численные оценки пороговых величин, задаваемых формулами (4.108) и (4.110), для параметров лазера на алюмоиттриевом гранате с ионами неодима. Используем время жизни фотона в резонаторе $\tau_c = 2,4 \cdot 10^{-8}$ с, характерное для непрерывного режима работы. Для порогового значения инверсии населенностей с помощью формулы (4.108) находим $N_{th} = 1,98 \cdot 10^{15}$ см⁻³. Мощность накачки на единицу объема связана со скоростью накачки посредством равенства $p = \hbar\omega_p w_p$, где $\hbar\omega_p$ — энергия фотона накачки. В рассматриваемом случае $\hbar\omega_p \approx 1,5$ эВ ($2,4 \cdot 10^{-19}$ Дж). С учетом того, что для четырехуровневой схемы $N_{eT} = 0$, из равенства (4.110) находим

$$(p)_{th} = \frac{\hbar\omega_p}{T_1\sigma c\tau_c}.$$

Подставляя в это выражение численные значения параметров, получаем для порогового значения плотности мощности накачки $(p)_{th} = 1,9$ Вт/см³.

Рассмотрим теперь взаимодействие излучения с веществом в несколько другой постановке. Пусть поток фотонов j_{ph} частоты ω распространяется вдоль оси z через среду, с активными центрами, имеющими резонансный частоте излучения дипольно-разрешенный переход. В случае, когда речь идет о лазерах, такая среда называется активной средой. На резонансном переходе будут происходить поглощения и вынужденные излучения фотонов. Кроме того, предположим возможность других механизмов ослабления фотонного пучка. Уравнение, описывающее интенсивность излучения $I = \hbar\omega j_{ph}$ как функцию пройденного расстояния вдоль оси z , легко получить из второго балансного уравнения (4.106). Для этого в нем нужно произвести замены:

$$n_{ph} \rightarrow \frac{I}{\hbar\omega c}; \quad t \rightarrow \frac{z}{c},$$

ввести коэффициент экстинкции (ослабления)

$$\kappa_{\text{ext}} = \frac{1}{c\tau_c},$$

коэффициент усиления/поглощения излучения на резонансном переходе $\kappa = \sigma N$. Тогда вместо (4.106) находим

$$\frac{dI}{dz} = (\kappa - \kappa_{\text{ext}}) I. \quad (4.111)$$

Ясно, что для усиления излучения на резонансном переходе требуется выполнение неравенства $\kappa > 0$, откуда с учетом положительности сечения излучательного перехода следует *необходимое* условие лазерной генерации (4.107). В простейшем случае, когда инверсия населенностей и коэффициент экстинкции не зависят от координаты z , решение (4.111) имеет вид

$$I(z) = I(0) \exp[(\kappa - \kappa_{\text{ext}})z]$$

(закон Бугера—Ламберта—Бера). Отсюда следует, что достаточным условием усилением излучения на участке активной среды является выполнение соотношения $\kappa > \kappa_{\text{ext}}$. Это неравенство может быть переписано в виде

$$\sigma N > \frac{1}{c\tau_c}$$

или

$$N > N_{\text{th}} = \frac{1}{\sigma c\tau_c},$$

что совпадает с определением ранее введенной пороговой инверсии населенностей (4.108). Таким образом, для усиления света в участке активной среды должна быть достигнута пороговая инверсия населенностей.

Эффект насыщения (4.105) может быть записан через интенсивности излучения $I = cn_{\text{ph}}\hbar\omega$:

$$N(I) = \frac{N_e}{1 + I/I_{\text{sat}}}, \quad (4.112)$$

где I_{sat} — интенсивность насыщения, при которой инверсия населенностей уменьшается в два раза по сравнению со своим значением в отсутствие излучения,

$$I_{\text{sat}} = \frac{\hbar\omega_0}{2\sigma T_1}.$$

Из равенства (4.112) следует выражение для насыщенного коэффициента усиления:

$$\kappa(I) = \frac{\kappa_e}{1 + I/I_{\text{sat}}}, \quad (4.113)$$

где $\kappa_e = \sigma N_e$ — ненасыщенный коэффициент усиления. Из формулы (4.113) следует, что с ростом интенсивности излучения коэффициент усиления на резонансном переходе падает. Это падение связано с уменьшением инверсии населенностей за счет увеличения вклада вынужденных переходов с верхнего энергетического уровня на нижний уровень. Насыщение коэффициента усиления приводит к тому, что возникает ограничение на интенсивность лазерного излучения, которую можно получить в режиме непрерывной генерации:

$$I < I_{\text{sat}} = \frac{\hbar\omega_0}{2\sigma T_1}.$$

Отметим, что полученные выражения (4.105) и (4.113), описывающие эффект насыщения, справедливы для однородно уширенной линии резонансного перехода, когда однородная ширина $\Delta\omega_0$ (4.34) много больше неоднородной ширины $\Delta\omega_{\text{inh}}$. Напомним, что параметр $\Delta\omega_{\text{inh}}$ определяет разброс собственных частот резонансного перехода под действием внешнего окружения. Эта ситуация реализуется в твердотельном лазере на алюмоиттриевом гранате с неодимом, для которого $\Delta\omega_0 \cong 1,2 \cdot 10^{12}$ Гц (при комнатной температуре), в то время как $\Delta\omega_{\text{inh}}$ не превышает 10^{10} Гц. Большая однородная ширина в данном случае вызвана взаимодействием оптических электронов неодима с фононами (колебаниями кристаллической решетки). Это взаимодействие уменьшается с уменьшением температуры, поскольку тогда колебания решетки становятся менее интенсивными, как говорят, «вымораживаются» фононные степени свободы. В результате однородная ширина падает, и при температурах порядка -180°C неоднородное уширение сравнивается с однород-



ным. В газовых лазерах, напротив, доминирует неоднородное уширение линии, вызванное тепловым разбросом скоростей излучающих атомов и эффектом Доплера.

При воздействии мощного монохроматического излучения (излучения накачки) с частотой ω и интенсивностью, превышающей интенсивность насыщения I_{sat} , на *неоднородно уширенный* ансамбль невозбужденных двухуровневых систем вследствие эффекта насыщения происходит выравнивание населенностей N_1 и N_2 тех ДС, чьи собственные частоты совпадают с частотой излучения. Если теперь подействовать маломощным (пробным) лучом с переменной частотой ω' на этот ансамбль ДС, то окажется, что поглощение пробного излучения будет отсутствовать на частоте $\omega' = \omega$. Иными словами, излучение накачки «выжгло провал» в спектре поглощения неоднородно уширенного ансамбля частиц. Данное явление используется в спектроскопии для определения однородной ширины спектральной линии, в случае, если оно замаскировано неоднородным уширением.

Динамика лазерной генерации: пиковый режим

Для исследования динамики лазерной генерации балансные уравнения (4.104) и (4.106) удобно переписать через переменные, нормированные на свои стационарные значения:

$$\tilde{N} = \frac{N}{N_{\text{st}}} \quad \text{и} \quad \tilde{n}_{\text{ph}} = \frac{n_{\text{ph}}}{(n_{\text{ph}})_{\text{st}}}.$$

Тогда с помощью формул (4.108) и (4.109) получаем следующую систему балансных уравнений в безразмерных переменных:

$$\dot{\tilde{N}} + \frac{\tilde{N} - \tilde{N}_e}{\tilde{T}_1} = -\frac{\tilde{N}\tilde{n}_{\text{ph}}}{\tilde{T}_1} (\tilde{N}_e - 1); \quad (4.114)$$

$$\dot{\tilde{n}}_{\text{ph}} = \tilde{n}_{\text{ph}} (\tilde{N} - 1). \quad (4.115)$$

где \tilde{N}_e — величина, называемая превышением накачки над порогом,

$$\tilde{N}_e = \frac{N_e}{N_{\text{st}}} = \frac{N_e}{N_{\text{th}}};$$

\tilde{T}_1 — время продольной релаксации:

$$\tilde{T}_1 = \frac{T_1}{\tau_c},$$

выраженное через время жизни фотона в резонаторе, точка обозначает дифференцирование по безразмерному времени

$$\tau = \frac{t}{\tau_c}.$$

Из системы уравнений (4.114)—(4.115) сразу видно, что $\dot{N} = 1$ и $\dot{n}_{ph} = 1$ являются ее стационарными решениями. Действительно, при подстановке этих значений в уравнения (4.114), (4.115) получаем

$$\dot{N} = \dot{n}_{ph} = 0,$$

т. е. инверсия населенностей и концентрация фотонов перестают зависеть от времени. Кроме того, из (4.114) следует, что для усиления фотонного поля в резонаторе необходимо выполнение неравенства $\tilde{N} > 1$ — превышение инверсии населенностей над своим пороговым значением. Тогда $\dot{n}_{ph} > 0$ и концентрация фотонов в резонаторе с течением времени возрастает.

Система балансных уравнений (4.114)—(4.115) является нелинейной системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Она содержит члены, пропорциональные произведению искомым функций. Вследствие этого данная система не имеет решения в аналитическом виде. Ее, однако, несложно решить численно. Временные зависимости нормированной инверсии населенностей и нормированной концентрации фотонов, полученные таким образом, приведены на рис. 4.4 для следующих значений параметров: $\tilde{T}_1 = 100$, $\tilde{N}_e = 10$. Рассчитанные функции представляют собой затухающие осцилляции, сдвинутые друг относительно друга примерно на полпериода.

Видно, что максимуму фотонной концентрации по временной шкале соответствует значение инверсии населенностей, близкое к минимуму. Данное обстоятельство связано с тем, что по мере увеличения числа фотонов растет количество индуцированных переходов системы из верхнего состояния в нижнее, что и приводит к уменьшению инверсии населенностей. Это также следует из уравнения (4.114), в котором в правой части со знаком минус (для $\tilde{N}_e > 1$)



входит концентрация фотонов, рост которой приводит к увеличению отрицательной производной по времени для инверсии населенностей. С увеличением времени нормированная инверсия населенности и нормированная концентрация фотонов выходят на насыщение, причем соответствующие предельные значения этих величин равны единице, как и должно быть для стационарных решений системы (4.114)—(4.115).

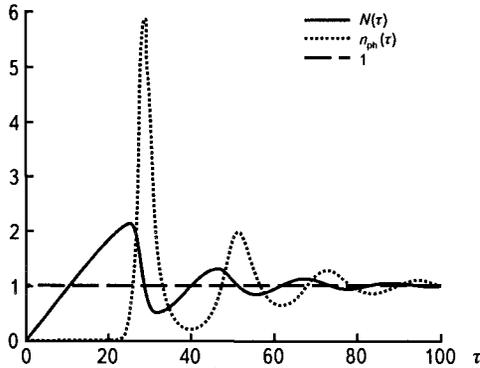


Рис. 4.4. Временные зависимости нормированной инверсии населенностей (сплошная кривая) и нормированной концентрации фотонов (пунктирная), являющиеся решением системы балансных уравнений (4.114)—(4.115) при $\tilde{T}_1 = 100$, $\tilde{N}_e = 10$, $\tau = \frac{t}{\tau_c}$

С уменьшением параметра \tilde{N}_e , который по-прежнему остается больше единицы, увеличивается амплитуда колебаний нормированной фотонной плотности, а время появления ее первого максимума растет. Максимальное значение нормированной инверсии населенности при этом изменяется слабо. Данные замечания иллюстрируются зависимостями рис. 4.5, построенными для превышения накачки над порогом $\tilde{N}_e = 4$ ($\tilde{T}_1 = 100$).

Аналогичные изменения в функциях $\tilde{N}(\tau)$ и $\tilde{n}_{ph}(\tau)$ происходят при увеличении отношения T_1/t_c , что показано на графиках рис. 4.6.

Отметим, что если начальное значение фотонной концентрации равно нулю, то решение системы балансных уравнений для $\tilde{n}_{ph}(\tau)$ дает нуль во всем временном интервале, как легко убедиться непосредственно из вида уравнений (4.114)—(4.115). Нормированная ин-

версия населенностей при этом монотонно возрастает вплоть до равновесного значения \tilde{N}_e . Из вышесказанного следует, что для возникновения лазерной генерации необходимы «затравочные» фотоны, которые возникают в результате спонтанных переходов системы из верхнего рабочего состояния в нижнее состояние.

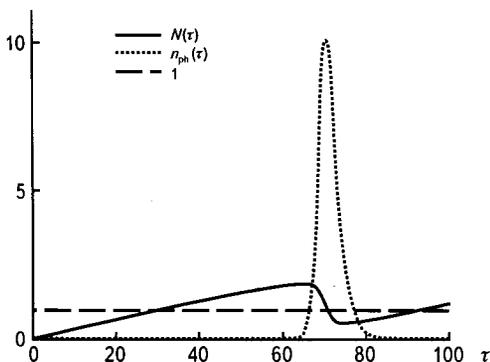


Рис. 4.5. То же, что на рис. 4.4 для $\tilde{N}_e = 4$, $\tilde{T}_1 = 100$

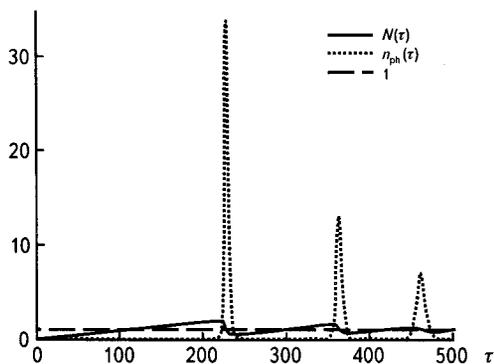


Рис. 4.6. То же, что на рис. 4.4 для $\tilde{T}_1 = 10^3$, $\tilde{N}_e = 10$

Таким образом, спонтанное излучение, хотя непосредственно и не входит в балансное уравнение для концентрации фотонов, играет принципиальную роль в математическом описании лазерной генерации, поскольку обеспечивает ненулевое начальное значение фотонной концентрации $\tilde{n}_{ph}(t=0) \neq 0$.

Как видно из рис. 4.4—4.6, лазерное излучение при стационарных параметрах

$$\tilde{N}_e = \frac{N_e}{N_{\text{th}}} \quad \text{и} \quad \tilde{T}_1 = \frac{T_1}{\tau_c}$$

представляет собой последовательность максимумов и минимумов — так называемый «пиковый» режим. Существуют и другие режимы работы лазеров, такие, как режим *модуляции добротности* и *синхронизации мод*, в которых параметры системы меняются специальным образом, для получения коротких и сверхкоротких лазерных импульсов.

Вышеизложенное описание электрон-фотонного взаимодействия в рамках балансных уравнений отличается простотой и позволяет получить ряд важных выводов. В то же время оно недостаточно при рассмотрении эффектов, в которых существенную роль играют фазовые соотношения между электромагнитным полем и веществом. Тогда необходимо использовать последовательный подход, основанный на квантовой механике, чему посвящены следующие главы настоящей книги.

Литература

1. *Эйнштейн А.* Испускание и поглощение излучения по квантовой теории. Собрание научных трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966, с. 386—392.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Физматлит, 2003, 534 с.
3. *Буреева Л.А., Лисица В.С.* Возмущенный атом. М.: ИздАТ, 1997, 464 с.
4. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: ГИФМЛ., 1960, 562 с.
5. *Лисица В.С.* Штарковское уширение линий водорода в плазме. УФН, 1977. Т. 122, № 3, с. 449.
6. *Астапенко В.А., Фомичев А.А.* Когерентные процессы и интерференционные эффекты в лазерной физике. М.: МФТИ, 2003, 104 с.

ГЛАВА 5 ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМОВ И НАНОЧАСТИЦ

Динамическая поляризуемость является важнейшей величиной, характеризующей свойства системы по отношению к электромагнитному воздействию. С ее помощью можно определить характеристики ряда излучательных процессов. Поэтому методы расчета динамической поляризуемости являются существенной составной частью описания взаимодействия фотонов с веществом на микроскопическом уровне [1].

5.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИПОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ

Динамическая (дипольная) поляризуемость $\beta(\omega)$ представляет собой важную спектроскопическую характеристику атомов и нанообъектов, описывающую отклик на внешнее электромагнитное возмущение в случае, если напряженность возмущающего поля много меньше атомной напряженности

$$E \ll E_a = \frac{m_e^2 e^5}{\hbar^4} \cong 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см},$$

а длина электромагнитной волны много больше размеров атома.

С математической точки зрения поляризуемость представляет собой в общем случае тензор второго ранга β_{ij} , связывающий наведенный в электронном остове частицы дипольный момент d и напряженность внешнего электрического поля E :

$$d_i(\omega) = \sum_j \beta_{ij}(\omega) E_j(\omega). \quad (5.1)$$

Для сферически-симметричных систем поляризуемость β_{ij} сводится к скаляру:

$$\beta_{ij}(\omega) = \beta(\omega)\delta_{ij}, \quad (5.2)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, равный единице, если индексы имеют одинаковое значение, и нулю — в противном случае. Тогда равенство (5.1) принимает простой вид:

$$\mathbf{d}(\omega) = \beta(\omega)\mathbf{E}(\omega). \quad (5.3)$$

Поляризуемость атомов определяет диэлектрическую проницаемость среды $\varepsilon(\omega)$ в соответствии с формулой Клаузиуса—Мосотти:

$$\frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 2} = \frac{4}{3}\pi N_a \beta(\omega), \quad (5.4)$$

где N_a — концентрация атомов вещества. Для простоты в (5.4) предположено, что среда состоит из атомов одного сорта.

Заметим, что в основе ряда экспериментальных методик определения динамической поляризуемости $\beta(\omega)$ лежит ее связь с показателем преломления вещества [который для прозрачной среды определяется равенством $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$], следующая из равенства (5.4).

Динамическая поляризуемость определяет сдвиг энергии атомного уровня ΔE_n во внешнем электрическом поле. Во втором порядке теории возмущений для нерезонансного внешнего поля E и сферически-симметричного электронного состояния соответствующая поправка к энергии имеет вид

$$\Delta E_n^{(2)} = -\frac{1}{2}\beta_n(\omega)E^2. \quad (5.5)$$

Формула (5.5) описывает квадратичный эффект Штарка. В случае, когда частота внешнего поля совпадает с собственной частотой атома, сдвиг энергии оказывается линейным по напряженности электрического поля — линейный эффект Штарка. Линейный эффект Штарка реализуется также в случае вырожденного по величине орбитального момента атомного состояния, как это имеет место для атома водорода и водородоподобных ионов.

Статическая поляризуемость, т. е. поляризуемость на нулевой частоте $\beta(\omega = 0)$, определяет сдвиг уровня в постоянном электри-

ческом поле и, кроме того, потенциал межатомного взаимодействия на больших расстояниях (потенциал взаимодействия Ван-дер-Ваальса). Поскольку статическая поляризуемость является положительной величиной (см. ниже), то из равенства (5.5) следует, что энергия невырожденного атомного состояния уменьшается в присутствии постоянного электрического поля. Потенциал взаимодействия нейтрального атома с медленной заряженной частицей на больших расстояниях также определяется его статической поляризуемостью

$$V_{\text{pol}}(r) = -e_0^2 \frac{\beta(0)}{2r^4}, \quad (5.6)$$

где e_0 — заряд частицы. С использованием (5.6) можно получить следующее выражение для сечения упругого столкновения заряженной частицы с атомом в случае применимости классического приближения для описания движения налетающей частицы с энергией E :

$$\sigma_{\text{scat}}^{\text{el}}(E) = 2\pi e_0 \sqrt{\frac{\beta(0)}{2E}}. \quad (5.7)$$

Отметим, что равенство (5.7) следует (с точностью до коэффициента, равного 2) из (5.6), если определить эффективный радиус рассеяния r_E с помощью уравнения

$$E = |V_{\text{pol}}(r_E)|. \quad (5.8)$$

5.2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМА

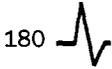
Выражение для динамической поляризуемости атома может получено без использования квантовой механики с помощью спектроскопического принципа соответствия, изложенного в гл. 4.

Вычислим дипольный момент атома \mathbf{d} в монохроматическом поле

$$\mathbf{E}(t) = 2 \operatorname{Re} \{ \mathbf{E}_\omega \exp(-i\omega t) \},$$

который по определению равен

$$\mathbf{d}(t) = 2 \operatorname{Re} \{ \beta(\omega) \mathbf{E}_\omega \exp(-i\omega t) \}. \quad (5.9)$$



Фурье-компонента дипольного момента дается выражением

$$\mathbf{d}_\omega = \beta(\omega) \mathbf{E}_\omega. \quad (5.10)$$

В формулах (5.9) и (5.10) \mathbf{E}_ω — комплексный вектор напряженности электрического поля в монохроматическом излучении, являющийся Фурье-компонентой от $\mathbf{E}(t)$.

Напомним, что дипольный момент атома в отсутствие внешних полей равен нулю в силу сферической симметрии, поэтому величина наведенного дипольного момента действительно может служить мерой возмущения атома внешним воздействием. Линейная зависимость $\mathbf{d}(t)$ от напряженности электрического поля (5.9) справедлива в случае малости величины E в смысле выполнения неравенств (1.9). Таким образом, для достаточно малых полей отклик атома на электромагнитное возмущение может быть охарактеризован его поляризуемостью $\beta(\omega)$.

Согласно спектроскопическому принципу соответствия изменение состояния атома складывается из изменения движения осцилляторов, соответствующих переходам между атомными состояниями (осцилляторов переходов). Неравенства (1.9) означают малость возмущения состояния атомного электрона в результате действия электромагнитного поля. Таким образом, можно считать отклонения осцилляторов переходов от положения равновесия под воздействием поля $\mathbf{E}(t)$ малыми, поэтому для n -го осциллятора справедливо уравнение движения в гармоническом приближении:

$$\ddot{\mathbf{r}}_n + \delta_{0n} \dot{\mathbf{r}}_n + \omega_{0n}^2 \mathbf{r}_n = \frac{e}{m} f_{0n} \mathbf{E}(t), \quad (5.11)$$

где \mathbf{r}_n — радиус-вектор, соответствующий отклонению осциллятора перехода от положения равновесия; δ_{0n} , ω_{0n} , f_{0n} — константа затухания, собственная частота и сила осциллятора. Для простоты рассматриваем одноэлектронный атом в основном состоянии, дипольный момент которого равен $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$. (В случае многоэлектронного атома дипольный момент равен сумме дипольных моментов атомных электронов.) В силу принципа соответствия наведенный дипольный момент атома складывается из наведенных дипольных моментов осцилляторов переходов в n -е состояние \mathbf{d}_n :

$$\mathbf{d} = \sum_n \mathbf{d}_n = e \sum_n \mathbf{r}_n.$$

Переходя в этом равенстве к Фурье-компонентам, имеем

$$\mathbf{d}_\omega = e \sum_n \mathbf{r}_{n\omega}, \quad (5.12)$$

где $\mathbf{r}_{n\omega}$ — Фурье-образ радиуса-вектора отклонения осциллятора перехода от положения равновесия. Выражение для этой величины следует из уравнения движения (5.11):

$$\mathbf{r}_{n\omega} = \frac{e}{m} \frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2 - \omega^2 - i\omega\delta_{0n}} \mathbf{E}_\omega. \quad (5.13)$$

Подставляя формулу (5.13) в равенство (5.12) и используя определение поляризуемости (5.10), находим для нее следующее выражение:

$$\beta(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_n \frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2 - \omega^2 - i\omega\delta_{0n}}. \quad (5.14)$$

Отсюда вытекает, что динамическая поляризуемость атома представляет собой, вообще говоря, комплексную величину с размерностью объема. Мнимая часть поляризуемости пропорциональна константам затухания осцилляторов переходов. Сумма в правой части равенства (5.14) включает в себя как суммирование по дискретному энергетическому спектру, так и интегрирование по непрерывному спектру энергии. Мнимая часть поляризуемости ответственна за поглощение излучения, а действительная часть определяет преломление электромагнитной волны в среде. Выражение (5.14) описывает не только одноэлектронный, но и многоэлектронный атом. Многоэлектронность атома учитывается тем обстоятельством, что в определении силы осциллятора (4.51) дипольный момент атома равен сумме дипольных моментов его электронов.

Из равенства (5.14) можно получить несколько важных предельных случаев. Так, если частота внешнего поля равна нулю, то формула (5.14) дает выражение для статической поляризуемости атома:

$$\beta_0 \equiv \beta(\omega = 0) = \frac{e^2}{m} \sum_n \frac{f_{0n}}{\omega_{0n}^2}. \quad (5.15)$$

Отсюда видно, что статическая поляризуемость — действительная и положительная величина. Она имеет большое численное значение,

если в спектре атома есть переходы с большой силой осциллятора и малой собственной частотой.

В противоположном, высокочастотном, пределе, когда $\hbar\omega \gg I_p$ (I_p — потенциал ионизации атома) и можно пренебречь собственными частотами в знаменателях (5.14), из формулы (5.14) с учетом золотого правила сумм (4.52), получаем

$$\beta_{\infty}(\omega) = -\frac{e^2 N_e}{m\omega^2}. \quad (5.16)$$

Высокочастотная поляризуемость атома (5.16) — действительная и отрицательная величина.

Если частота внешнего поля близка к одной из собственных частот осцилляторов перехода, так что выполняется условие резонанса

$$|\omega - \omega_{0n}| \leq \delta_{0n}, \quad (5.17)$$

и можно оставить одно резонансное слагаемое в сумме (5.14), то из (5.14) следует выражение для резонансной поляризуемости:

$$\beta_{\text{res}}(\omega) = \left(\frac{e^2}{2m\omega_{0n}} \right) \frac{f_{0n}}{\omega_{0n} - \omega - i\delta_{0n}/2}. \quad (5.18)$$

При выводе (5.18) из (5.14) в нерезонансных комбинациях было пренебрежено отличием частоты внешнего поля от собственной частоты перехода. Резонансная поляризуемость является комплексной величиной, действительная часть которой может быть как положительной, так и отрицательной.

Равенство (5.10), определяющее динамическую поляризуемость, после взятия обратного Фурье-преобразования может быть переписано в виде

$$d(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(\tau) E(t - \tau) d\tau, \quad (5.19)$$

где $\beta(\tau)$ — действительная функция времени, Фурье-образ которой равен динамической поляризуемости $\beta(\omega)$. Наиболее простое выражение для $\beta(\tau)$ следует из формулы (5.18):

$$\beta_{\text{res}}(\tau) = \frac{e^2 f_{0n}}{2m\omega_{0n}} (-i)\theta(\tau) \exp\left(-i\omega_{0n}\tau - \delta_{0n} \frac{\tau}{2}\right), \quad (5.20)$$

где $\theta(\tau)$ — ступенчатая функция Хэвисайда. Временная зависимость наведенного дипольного момента $\mathbf{d}(t)$ совпадает с временной зависимостью правой части равенства (5.20) для дельта-импульса поля:

$$\mathbf{E}(t) = E_0 \delta(t),$$

где $\delta(t)$ — дельта-функция Дирака. В общем случае выражение для $\beta(\tau)$ может быть получено путем замены частоты

$$\omega_{0n} \rightarrow \sqrt{\omega_{0n}^2 - \left(\frac{\delta_{0n}}{2}\right)^2}$$

и суммирования по всем осцилляторам переходов. Заметим, что уменьшение собственной частоты колебаний с учетом затухания, следующее из приведенной замены, вполне естественно, поскольку трение (аналог затухания) уменьшает скорость движения.

5.3. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ

Из формулы (5.20), в частности, следует равенство нулю функции $\beta(\tau)$ для времен $\tau < 0$, что является отражением принципа *причинности*. Действительно, как это видно из (5.19), чтобы следствие по времени было позже его причины, необходимо выполнение условия: $\beta(\tau < 0) = 0$. Принцип причинности налагает определенные ограничения на вид функции $\beta(\omega)$, откуда вытекают соотношения *Крамерса—Кронига*, связывающие действительную и мнимую часть динамической поляризуемости. Эти формулы имеют вид

$$\operatorname{Re}\{\beta(\omega)\} = \frac{1}{\pi} VP \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}\{\beta(\omega')\}}{\omega' - \omega} d\omega'; \quad (5.21)$$

$$\operatorname{Im}\{\beta(\omega)\} = \frac{1}{\pi} VP \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re}\{\beta(\omega')\}}{\omega - \omega'} d\omega', \quad (5.22)$$

введен интеграл в смысле главного значения:

$$VP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{a-\Delta} \frac{f(x)}{x-a} dx + \int_{a+\Delta}^{+\infty} \frac{f(x)}{x-a} dx \right\}. \quad (5.23)$$



Пользуясь равенствами (5.21) и (5.22), можно по мнимой части поляризуемости восстановить действительную часть и наоборот. При практическом использовании в формуле (5.21) удобно перейти к интегрированию по положительным частотам и представить главное значение интеграла в виде интеграла с «выколотой» точкой. Тогда имеем:

$$\operatorname{Re}[\beta(\omega)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \operatorname{Im}[\beta(\omega')] - \omega \operatorname{Im}[\beta(\omega)]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (5.24)$$

При выводе (5.24) было учтено, что мнимая часть поляризуемости является нечетной функцией частоты.

Имеет место важное соотношение, связывающее мнимую часть динамической поляризуемости и сечение фотопоглощения $\sigma_{\text{ph}}(\omega)$ (см. разд. 4.6). Это соотношение называется *оптической теоремой* и имеет вид:

$$\operatorname{Im}[\beta(\omega)] = \frac{c}{4\pi\omega} \sigma_{\text{ph}}(\omega). \quad (5.25)$$

С помощью оптической теоремы из формулы (5.24) можно найти:

$$\operatorname{Re}[\beta(\omega)] = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sigma_{\text{ph}}(\omega') - \sigma_{\text{ph}}(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (5.26)$$

Равенство (5.26) дает выражение действительной части поляризуемости через сечение фотопоглощения. В частности, для статической поляризуемости имеем:

$$\beta(0) = \frac{c}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\sigma_{\text{ph}}(\omega)}{\omega^2} d\omega. \quad (5.27)$$

Из (5.26) можно получить правило сумм для сечения фотопоглощения, если перейти к пределу $\omega \rightarrow \infty$ и воспользоваться выражением (5.16) для высокочастотной поляризуемости:

$$\frac{c}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \sigma_{\text{ph}}(\omega) d\omega = N; \quad \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \omega \operatorname{Im}\{\beta(\omega)\} d\omega = N. \quad (5.28)$$

Второе равенство в (5.28) следует из первого с учетом оптической теоремы (5.25).

Как отмечалось, вышеприведенные формулы для поляризуемости справедливы для сферически-симметричного состояния атома. В общем случае тензор β_{ij} для атома, находящегося в состоянии $|nlm\rangle$, где n, l, m — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа, может быть представлен в виде [2]

$$\beta_{ij} = \begin{bmatrix} \beta_{nl}^s - \frac{1}{2} P_2 \beta_{nl}^a & \frac{i}{2} P_1 \beta_{nl}^a & 0 \\ -\frac{i}{2} P_1 \beta_{nl}^a & \beta_{nl}^s - \frac{1}{2} P_2 \beta_{nl}^a & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{nl}^s + P_2 \beta_{nl}^t \end{bmatrix}. \quad (5.29)$$

Здесь введены $\beta_{nl}^s, \beta_{nl}^a, \beta_{nl}^t$ — соответственно скалярная, антисимметричная и тензорная компоненты поляризуемости. Функции магнитного и орбитального квантовых чисел $P_{1,2}(m)$ для $l \neq 0$ равны:

$$P_1(m) = \frac{m}{l}; \quad P_2(m) = \frac{3m^2 - l(l+1)}{l(2l-1)}. \quad (5.30)$$

Для сферически-симметричного состояния, когда $l = m = 0$, $P_1 = P_2 = 0$ и из формулы (5.29) следует, что поляризуемость атома сводится к скаляру (5.2).

С использованием (5.29) можно записать сдвиг и расщепление магнитных подуровней состояния $|nlm\rangle$ в переменном электрическом поле

$$E(t) = E \operatorname{Re} \{ e \exp(-i\omega t) \}$$

(e — в общем случае комплексный вектор, причем $|e| = 1$) вдали от резонанса в виде:

- для линейной поляризации электрического поля

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{4} E^2 \left[\beta_{nl}^s(\omega) + P_2(m) \beta_{nl}^t(\omega) \right]; \quad (5.31)$$

- для правой (+) и левой (−) циркулярных поляризаций единичного вектора e

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{4} E^2 \left[\beta_{nl}^s(\omega) \pm P_1(m) \beta_{nl}^a(\omega) - \frac{1}{2} P_2(m) \beta_{nl}^t(\omega) \right]. \quad (5.32)$$

Компоненты тензора поляризуемости β_{nl}^s , β_{nl}^a , β_{nl}^t равны:

$$\beta_{nl}^s(\omega) = \frac{1}{3(2l+1)} [l\sigma_{l-1}(\omega) + (l+1)\sigma_{l+1}(\omega)]; \quad (5.33)$$

$$\beta_{nl}^a(\omega) = \frac{1}{2l+1} [\sigma_{l-1}^-(\omega) - \sigma_{l+1}^-]; \quad (5.34)$$

$$\beta_{nl}^t(\omega) = -\frac{1}{3(2l+1)} \left[\sigma_{l-1}(\omega) + \frac{2l-1}{2l+3} \sigma_{l+1}(\omega) \right], \quad (5.35)$$

где

$$\sigma_{l'}(\omega) = \sum_{n'} \frac{f_{nl}^{n'l'}}{\omega_{n'n}^2 - \omega^2 - i\omega\delta_{n'n}}; \quad (5.36)$$

$$\sigma_{l'}^-(\omega) = \omega \sum_{n'} \frac{f_{nl}^{n'l'}}{\omega_{n'n}(\omega_{n'n}^2 - \omega^2 - i\omega\delta_{n'n})} \quad (5.37)$$

представляют собой соответствующие спектральные суммы.

Таким образом, формулы (5.29)–(5.37) обобщают понятие динамической (дипольной) поляризуемости атома на общий случай состояния $|nlm\rangle$ ($l \neq 0$), когда поляризуемость является тензором.

Выше речь шла о дипольной поляризуемости, которая описывает отклик атома на пространственно-однородное электрическое поле. В случае, если характерный размер пространственной однородности поля меньше размера атома, дипольная поляризуемость должна быть заменена на обобщенную поляризуемость атома $\beta(\omega, \mathbf{q})$, зависящую от переданного в результате взаимодействия импульса $\hbar\mathbf{q}$. С использованием $\beta(\omega, \mathbf{q})$ формула (5.1) модифицируется к виду

$$\mathbf{D}(\omega) = \int \beta(\omega, \mathbf{q}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{q}) \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}, \quad (5.38)$$

где $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{q})$ — пространственно-временной Фурье-образ электрического поля. Для пространственно-однородного поля $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{q}) = \mathbf{E}(\omega)\delta(\mathbf{q})$ равенство (5.38) (в случае сферически-симметричного атомного состояния) переходит в (5.1) с учетом того, что $\beta(\omega) = \beta(\omega, \mathbf{q} = 0)$.

5.4. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА (ИОНА)

Для основного состояния водородоподобного атома общее выражение (5.14) для дипольной поляризуемости может быть представлено в замкнутой аналитической форме:

$$\beta_{1s}(\omega) = -\frac{e^2}{m\omega^2} \{1 - T(E_{1s} + \hbar\omega) - T(E_{1s} - \hbar\omega)\};$$

$$T(E) = \frac{2^7 \eta^5}{(2-\eta)(1+\eta)^8} {}_2F_1 \left[2-\eta, 4, 3; \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^2 \right]; \quad (5.39)$$

$$\eta = Z \sqrt{\frac{Ry}{-2E}},$$

где Z — заряд ядра; ${}_2F_1(a, b, c, z)$ — гипергеометрическая функция; $E_{1s} = -Z^2 Ry$ — энергия основного состояния водородоподобного иона ($Ry = 13,6$ эВ).

Напомним, что гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a, b, c, z)$, фигурирующая в (5.39), определяется рядом

$${}_2F_1(a, b, c, z) = 1 + \frac{ab}{c}z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad (5.40)$$

который сходится в области $|z| < 1$, что имеет место для положительных значений параметра η . В противоположном случае необходимо пользоваться формулами аналитического продолжения гипергеометрических функций. Для значений параметра $\eta = 2, 3, \dots$ функция $T(E_{1s} + \hbar\omega)$ имеет полюсы, что соответствует резонансу между частотой внешнего поля ω и одной из собственных частот атома. Для больших частот $\hbar\omega \gg E_{1s}$ справедливо разложение правой части равенства (5.39) [ср. с формулой (5.16)]:

$$\beta_{1s}(\omega) \approx \frac{e^2}{m} \left\{ -\frac{1}{\omega^2} - \frac{4(2Ry/\hbar)^2}{3\omega^4} + \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{1+i}{\omega^{9/2}} \left(2 \frac{Ry}{\hbar} \right)^{3/2} + O(\omega^{-5}) \right\}. \quad (5.41)$$

Поляризуемость основного состояния водородоподобного атома может быть также представлена в виде ряда

$$\beta_{1s}(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\omega\Delta\omega_n}, \quad (5.42)$$

где ω_n — собственные частоты:

$$\omega_n = Z^2 \frac{n^2 - 1}{n^2} \frac{\text{Ry}}{\hbar}; \quad (5.43)$$

$\Delta\omega_n$ — ширина линии перехода; f_n — силы осцилляторов для переходов из основного состояния $1s \rightarrow np$:

$$f_n = n^5 \frac{2^8 (n-1)^{(2n-4)}}{3(n+1)^{(2n+4)}}, \quad (5.44)$$

где n — главное квантовое число возбужденного состояния, переходы в состояния с другими орбитальными моментами ($l \neq 1$) запрещены правилами отбора (см. разд. 4.3). Зависимость силы осциллятора от главного квантового числа возбужденного состояния (5.44) представлена на рис. 5.1 (ср. с табл. 4.1).

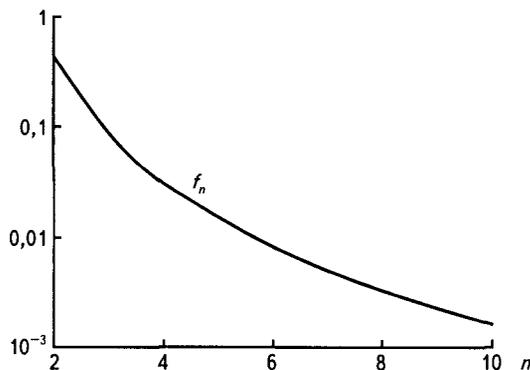


Рис. 5.1. Силы осцилляторов водородоподобного атома для переходов $1s \rightarrow np$

Существенно, что силы осцилляторов водородоподобного атома в соответствии с формулой (5.44) не зависят от заряда ядра.

В случае естественного уширения, когда затухание осциллятора перехода обусловлено только спонтанным излучением, ширина линии $\Delta\omega_n$ водородоподобного атома равна

$$\Delta\omega_n = A_n = Z^4 \frac{2^8 n(n-1)^{(2n-2)} Ry}{9(137)^3 (n+1)^{(2n+2)} \hbar}, \quad (5.45)$$

где A_n — коэффициент Эйнштейна для спонтанного перехода. Сравнивая (5.43) и (5.45), видим, что ширина линии перехода много меньше собственной частоты $\Delta\omega_n \ll \omega_n$, хотя быстрее увеличивается с ростом заряда ядра:

$$\frac{\Delta\omega_n}{\omega_n} \propto Z^2.$$

Реальная часть динамической поляризуемости основного состояния атома водорода, рассчитанная по формулам (5.42)—(5.45), представлена на рис. 5.2 для спектрального диапазона, отвечающего возбуждению атома в дискретном спектре.

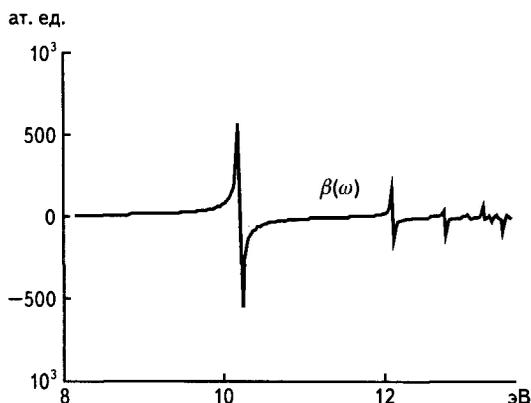


Рис. 5.2. Реальная часть динамической поляризуемости основного состояния атома водорода как функция частоты

Из рис. 5.2 видно, что реальная часть динамической поляризуемости атома водорода имеет острые экстремумы на собственных частотах ω_n . Мнимая часть поляризуемости отлична от нуля в узком интервале частот вблизи собственной частоты перехода.

Обобщенная динамическая поляризуемость $\beta(\omega, q)$ водородоподобного атома в основном и в возбужденных состояниях также может быть представлена в замкнутом аналитическом виде. Соответствующие выражения, однако, весьма громоздки, и мы их здесь не приводим.

5.5. СТАТИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМОВ И ИОНОВ

Статическая поляризуемость β_0 водородоподобного иона в основном $1s$ -состоянии равна:

$$\beta_0 = \frac{9}{2} \frac{a_B^3}{Z^4}, \quad (5.46)$$

где a_B — радиус Бора (4.19), т. е. быстро уменьшается с ростом заряда ядра. Величина статической поляризуемости резко возрастает с ростом главного квантового числа n . Эти закономерности легко понять на качественном уровне, если учесть, что статическая поляризуемость пропорциональна объему атома, который уменьшается с ростом Z и увеличивается с ростом n .

В случае многозарядных ионов ($N \ll Z$, N — число электронов в ионном остове, Z — заряд ядра иона) для статической поляризуемости может быть получено следующее приближенное выражение:

$$\beta_0 = \frac{63}{16} \frac{N^3}{Z^4} a_B^3. \quad (5.47)$$

Зависимость статической поляризуемости многозарядного иона от заряда ядра та же, что и для водородоподобного иона (5.46). Она следует из квантового рассмотрения для ионов с заполненными оболочками. В этом случае, если $Z \gg N$, минимальная частота виртуального перехода пропорциональна квадрату заряда ядра. Тогда из общего квантово-механического выражения для поляризуемости (5.14) следует вышеуказанная зависимость от Z .

Для ионов с незаполненными электронными оболочками основной вклад в статическую поляризуемость дает виртуальный переход без изменения главного квантового числа $\Delta n = 0$. В этом случае $\beta_0 \propto Z^{-3}$.

Для ионов с заполненной внешней оболочкой неплохое соответствие с экспериментом дает простая эмпирическая формула для ста-

тической дипольной поляризуемости внешней оболочки с главным квантовым числом n :

$$\beta_0 = N_n \frac{n^6}{Z_n^4} a_B^3, \quad (5.48)$$

где N_n и Z_n — число электронов во внешней электронной оболочке и эффективный заряд ядра соответственно. Последняя величина может быть определена как

$$Z_n = n \sqrt{\frac{I_n}{Ry}},$$

где I_n — потенциал ионизации внешней оболочки. Особенно хороший результат формула (5.48) дает для неоновподобных ионов ($n = 2$, $N_n = 8$). Это можно увидеть из табл. 5.1.

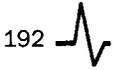
Таблица 5.1

Ион	Ca ⁺¹⁰	Ti ⁺¹²	Fe ⁺¹⁶	Co ⁺¹⁷	Ni ⁺¹⁸
I_n , эВ	558,2	737,8	1168	1293	1419
Z_n	12,8	14,73	18,54	19,5	20,43
β_0^{exp}	1,74 (–2)	1,04 (–2)	4,44 (–3)	3,69 (–3)	3,08 (–3)
β_0	1,89 (–2)	1,09 (–2)	4,33 (–3)	3,53 (–3)	2,94 (–3)

Примечание. Величина статической поляризуемости приведена в атомных единицах. Атомная единица поляризуемости равна $0,149 \text{ \AA}^3$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$). Число в круглых скобках обозначает степень 10, на которую нужно умножить предыдущее значение.

5.6. МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ ЧАСТОТЫ ДЛЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Локальная плазменная модель была предложена в середине шестидесятых годов Брандтом и Лундквистом [3] для описания фотопоглощения многоэлектронными атомами в спектральном диапазоне $\omega \sim Z$ ат. ед. (здесь 1 ат. ед. = 27,2 эВ — атомная единица энергии). В этом случае в отличие от диапазона больших ($\omega \sim Z^2$ ат. ед.)



и малых ($\omega \sim 1$ ат. ед.) частот поглощение фотона согласно вышеупомянутым авторам в большей степени определяется коллективными эффектами, а не одночастичным взаимодействием. На основании этих качественных соображений электронный остов атома аппроксимируется неоднородным распределением заряда, взаимодействие которого с электромагнитным полем определяется условием плазменного резонанса:

$$\omega = \omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi n(r)e^2}{m}}, \quad (5.49)$$

где $n(r)$ — локальная электронная плотность; $\omega_p(r)$ — соответствующая ей локальная плазменная частота. Можно показать, что условию (5.49) соответствует следующее выражение для дипольной динамической поляризуемости, удовлетворяющее соотношениям Крамерса—Кронига (5.21) и (5.22) и правилу сумм (5.28):

$$\beta^{\text{BL}}(\omega) = \int_0^{R_0} \frac{\omega_p^2(r)r^2 dr}{\omega_p^2(r) - \omega^2 - i0} = \int \beta^{\text{BL}}(r, \omega) dr. \quad (5.50)$$

Здесь введена величина $\beta^{\text{BL}}(r, \omega)$, которую естественно назвать пространственной плотностью поляризуемости в приближении Брандта—Лундквиста; R_0 — размер атома (иона). В знаменателе подынтегрального выражения (5.50) введена бесконечно малая мнимая добавка, указывающая правило обхода полюса при вычислении интеграла.

Выражение (5.50) имеет правильную высокочастотную асимптотику (5.16), а в низкочастотном пределе оно дает:

$$\beta^{\text{BL}}(\omega \rightarrow 0) \rightarrow \frac{R_0^3}{3}, \quad (5.51)$$

т. е. статическая поляризуемость оказывается пропорциональной объему атома.

Несмотря на кажущуюся простоту, формула (5.51) в ряде случаев хорошо описывает имеющиеся экспериментальные данные. Это в первую очередь относится к многоэлектронным атомам с замкнутыми оболочками, поскольку тогда основной вклад в поляризуемость дает непрерывный энергетический спектр атома, и приближение локальной плазменной частоты (5.50) наиболее адекватно. Указанное обстоятельство демонстрируется табл. 5.2, в которой при-

ведены значения (в атомных единицах) статической поляризуемости атомов и ионов с замкнутыми электронными оболочками, рассчитанные в рамках различных моделей, а также экспериментальные значения. При расчетах статической поляризуемости в модели Брандта—Лундквиста использовался радиус атома (иона), вычисленный с учетом корреляционной поправки в модели Томаса—Ферми—Дирака.

Таблица 5.2

Атом (ион)	KrI	XeI	KII	RbII	CsII	SrIII	BaIII
β_0^{exper}	17	27	7,5	12	16,3	6,6	11,4
β_0^{var}	26,8	30,9	9,1	14,3	17,8	8,7	11,4
β_0^{USh}	21,1	25,5	6,6	11,9	15,3	7,5	9,7
β_0^{SIZ}	17,2	27,3	5,25	8,5	14,6		
β_0^{BL}	24	27	8,6	11,6	13,5	7	8,4

Примечание. β_0^{var} — расчет вариационным методом; β_0^{USh} — расчет [4]; β_0^{SIZ} — расчет [5] в рамках формализма электронной плотности; $\beta_0^{\text{BL}} = \frac{R^3}{3}$ — расчет в модели Брандта—Лундквиста.

С использованием формулы (5.50) и статистической модели атома для динамической поляризуемости можно получить следующее выражение:

$$\beta(\omega, Z) = r_{\text{TF}}^3 \tilde{\beta}\left(\frac{\omega}{Z}\right) = \frac{b^3 a_{\text{B}}^3}{Z} \tilde{\beta}\left(\frac{\omega}{Z v_a}\right); \quad (5.52)$$

$$\tilde{\beta}(\nu) = \int_0^{x_0} \frac{4\pi f(x) x^2 dx}{4\pi f(x) - \nu^2 - i0},$$

где $r_{\text{TF}} = b a_{\text{B}} / Z^{1/3}$ — радиус Томаса—Ферми; Z — заряд ядра атома; a_{B} — боровский радиус; $b \cong 0,8853$; $\tilde{\beta}(\nu)$ — безразмерная поляризуемость как функция приведенной частоты $\nu = \omega / Z v_a$; $x_0 = R_0 / r_{\text{TF}}$ — приведенный радиус атома; $f(x)$ — универсальная функция, опи-

связывающая распределение электронной плотности $n(r)$ в атоме в соответствии с формулой

$$n(r) = Z^2 f\left(\frac{r}{r_{\text{TF}}}\right);$$

$\nu_a \cong 4,13 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ — атомная единица частоты.

Важно подчеркнуть, что безразмерная поляризуемость $\tilde{\beta}(\nu)$ не зависит от заряда ядра атома. Таким образом, представление динамической поляризуемости статистического атома (5.52) выявляет закон подобия (скейлинг) этой величины по параметру

$$\nu = \frac{\omega}{Z\nu_a}.$$

Результаты расчета действительной и мнимой частей дипольной динамической поляризуемости атома криптона в рамках метода локальной плазменной частоты по формуле (5.50) с использованием электронной плотности по Слэтеру и Ленцу—Иенсену представлены на рис. 5.3. На этом же рисунке (кривая 3) приведены результаты расчета соответствующих величин в приближении случайных фаз с обменом, которое является на настоящее время наиболее последовательным квантово-механическим способом описания электронной структуры атомов. Видно, что динамическая поляризуемость атома криптона, рассчитанная в модели локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца—Иенсена, сглаженным образом передает квантово-механические особенности частотного поведения динамической поляризуемости, наиболее ярко проявляющиеся вблизи потенциалов ионизации электронных подоболочек. Применение слэтеровских волновых функций в рамках данной модели позволяет до некоторой степени уловить спектральные колебания поляризуемости вблизи потенциалов ионизации электронных подоболочек. При этом, однако, нарушается универсальность описания, свойственная статистической модели атома.

Приведем высокочастотные асимптотики безразмерной поляризуемости, следующие из формулы (5.52), с учетом явного вида функции $f(x)$ для распределения электронной плотности Томаса—Ферми и Ленца—Иенсена. Для мнимой части $\tilde{\beta}(\nu)$ имеем:

$$\text{Im} \left\{ \tilde{\beta}^{\text{TF}}(\nu \rightarrow \infty) \right\} \rightarrow \frac{4,35}{\nu^4}; \quad (5.53a)$$

$$\text{Im} \left\{ \tilde{\beta}^{\text{LJ}}(\nu \rightarrow \infty) \right\} \rightarrow \frac{4,615}{\nu^4}. \quad (5.53б)$$

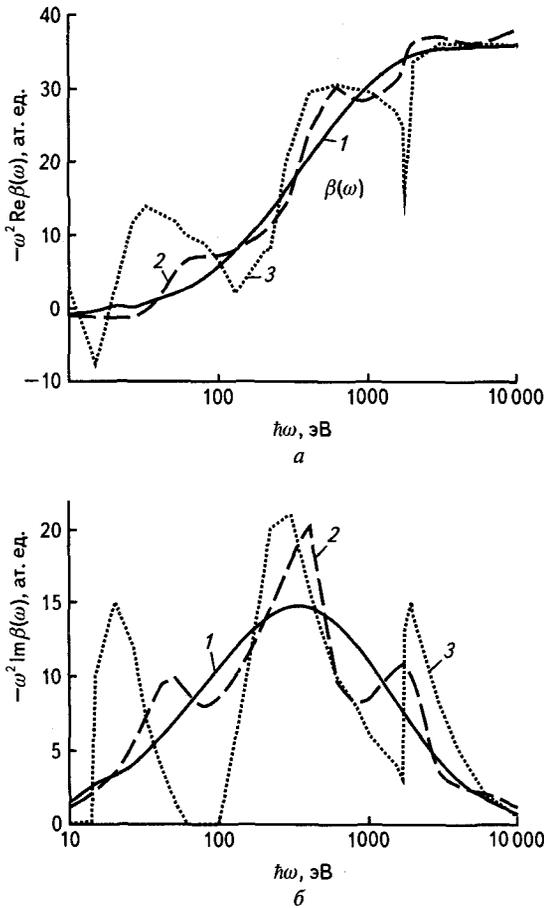


Рис. 5.3. Частотные зависимости реальной (а) и мнимой (б) частей поляризуемости атома криптона, вычисленные в различных приближениях: в приближении локальной плазменной частоты для электронной плотности Ленца—Иенсена (1), в приближении локальной плазменной частоты для слэтеровской электронной плотности (2), в приближении случайных фаз с обменом (3) [6]

Из формул (5.53) видно, что вышеуказанные статистические модели дают для мнимой части поляризуемости близкий результат. Заметим, что в водородоподобном приближении (для сферически-симметричного атомного состояния) мнимая часть поляризуемости спадает как $\nu^{-4.5}$. Высоочастотная асимптотика реальной части без-

размерной поляризуемости $\tilde{\beta}(\nu)$ в обеих моделях электронной плотности атомного остова имеет вид

$$\operatorname{Re}\{\tilde{\beta}(\nu \rightarrow \infty)\} \rightarrow -\frac{b^{-3}}{\nu^2}, \quad (5.54)$$

что находится в качественном соответствии с общей формулой (5.16). Из сравнения выражений (5.53) и (5.54), в частности, следует, что на больших частотах мнимая часть поляризуемости спадает существенно более быстро, чем ее действительная часть.

5.7. ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ НАНОЧАСТИЦ

Вычислим динамическую поляризуемость сферы, помещенной в диэлектрическую среду. Предполагаем, что радиус сферы существенно больше расстояния между атомами вещества сферы. Тогда для описания взаимодействия сферы с электромагнитным полем можно пользоваться понятием диэлектрической проницаемости.

Используя теорию Ми для расчета сечения рассеяния излучения на сферической частице радиуса r_s , можно получить следующее выражение для поляризуемости сферической частицы через коэффициенты Ми:

$$\beta_s = \frac{3}{2} \varepsilon_m \left(\frac{r_s}{x}\right)^3 [-ia_1(x, mx, m) + b_1(x, mx, m)], \quad (5.55)$$

где

$$x = kr_s = \sqrt{\varepsilon_m} \frac{\omega}{c} r_s; \quad (5.56)$$

m — относительный показатель преломления,

$$m = \sqrt{\frac{\varepsilon_s(\omega)}{\varepsilon_m}}; \quad (5.57)$$

$\varepsilon_m, \varepsilon_s(\omega)$ — диэлектрические проницаемости матрицы и материала сферы; a_n и b_n — коэффициенты Ми в разложении рассеянной волны вне сферы по полиномам Лежандра и сферическим функциям Ханкеля.

В дальнейшем предполагаем, что зависимостью величины ϵ_m от частоты излучения ω можно пренебречь.

С помощью граничных условий можно получить следующие формулы для коэффициентов Ми [7]:

$$a_n(x, y, m) = \frac{\psi'_n(y)\psi_n(x) - m\psi'_n(x)\psi_n(y)}{\psi'_n(y)\zeta_n(x) - m\zeta'_n(x)\psi_n(y)}, \quad (5.58)$$

$$b_n(x, y, m) = \frac{m\psi'_n(y)\psi_n(x) - \psi'_n(y)\psi'_n(x)}{m\psi'_n(y)\zeta_n(x) - \zeta'_n(x)\psi_n(y)}, \quad (5.59)$$

где

$$\psi_n(z) = z j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{n+1/2}(z); \quad (5.60)$$

$$\zeta_n(z) = z h_n^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} H_{n+1/2}^{(1)}(z) \quad (5.61)$$

есть функции, введенные Дебаем в 1909 г.; $j_n(z)$ — сферическая функция Бесселя; $J_{n+1/2}(z)$ и $H_{n+1/2}^{(1)}(z)$ — функции Бесселя и Ханкеля полуцелого порядка. Для $n = 1$ имеем

$$j_1(z) = \frac{\sin(z)}{z^2} - \frac{\cos(z)}{z}; \quad (5.62)$$

$$h_1^{(1)}(z) = \frac{\sin(z)}{z^2} - \frac{\cos(z)}{z} - i \left[\frac{\sin(z)}{z} + \frac{\cos(z)}{z^2} \right]. \quad (5.63)$$

В пределе малого параметра $x = kr_s$ из формул (5.58)—(5.63) можно получить следующие разложения для коэффициентов Ми [7]:

$$a_1 \equiv isx^3(1 + tx^2 - isx^3); \quad b_1 = isux^5, \quad (5.64)$$

где

$$s = \frac{2}{3} \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}; \quad t = \frac{3}{5} \frac{m^2 - 2}{m^2 + 2}; \quad u = \frac{1}{30} (m^2 + 2) \quad (5.65)$$

являются вспомогательными функциями относительного показателя преломления.

С учетом формул (5.64) и (5.65) в пределе $x = kr_s \ll 1$ из (5.55) имеем формулу Лоренца для поляризуемости малой сферической частицы радиуса r_s и диэлектрической проницаемостью $\epsilon_s(\omega)$, которая помещена в матрицу с диэлектрической проницаемостью ϵ_m :

$$\beta_s(\omega, r_s) = r_s^3 \epsilon_m \frac{\epsilon_s(\omega) - \epsilon_m}{\epsilon_s(\omega) + 2\epsilon_m}. \quad (5.66)$$

Выражение (5.66) справедливо для достаточно малого радиуса наносферы

$$r_s \ll 2\pi\sqrt{\epsilon_m}\lambda,$$

где λ — длина волны рассеянного фотона. Анализ показывает, что для металлической сферы в стекле формула (5.66) для оптического и примыкающих к нему спектральных диапазонов «работает» для радиусов наносферы, меньших 20 нм.

Заметим, что выражение (5.66) с точностью до множителя ϵ_m можно получить с помощью формулы Клаузиуса—Моссоти (5.4), если в последней положить

$$\epsilon(\omega) = \frac{\epsilon_s(\omega)}{\epsilon_m}; \quad N_a = \frac{1}{V_s},$$

где V_s — объем сферы.

Из формулы (5.66) следует, что динамическая поляризуемость сферы малого радиуса имеет максимум для частоты ω_r , определяемой равенством нулю действительной части знаменателя в правой части равенства (5.66):

$$\text{Re}\{\epsilon_s(\omega_r) + 2\epsilon_m\} = 0. \quad (5.67)$$

Резонанс (5.67) связан с возбуждением плазмонов на поверхности рассматриваемой сферы.

Диэлектрическая проницаемость $\epsilon_s(\omega)$, фигурирующая в (5.66), может быть выражена через действительную n_s и мнимую κ_s части коэффициента преломления материала сферы по известной формуле:

$$\epsilon_s(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) = [n_s(\omega)]^2 - [\kappa_s(\omega)]^2 + 2in_s(\omega)\kappa_s(\omega). \quad (5.68)$$

Спектральные зависимости компонент показателя преломления $n_s(\omega)$ и $\kappa_s(\omega)$ для ряда металлов определены экспериментально в работе [8] в диапазоне энергий фотона $\hbar\omega$ от 0,64 до 6,6 эВ. Эксперименты проводились на тонких пленках толщиной от 18,5 до 50 нм. При этом

было установлено, что комплексный коэффициент преломления не зависит от толщины пленки в диапазоне от 25 до 50 нм. Соответствующие графики для серебра и золота приведены на рис. 5.4.

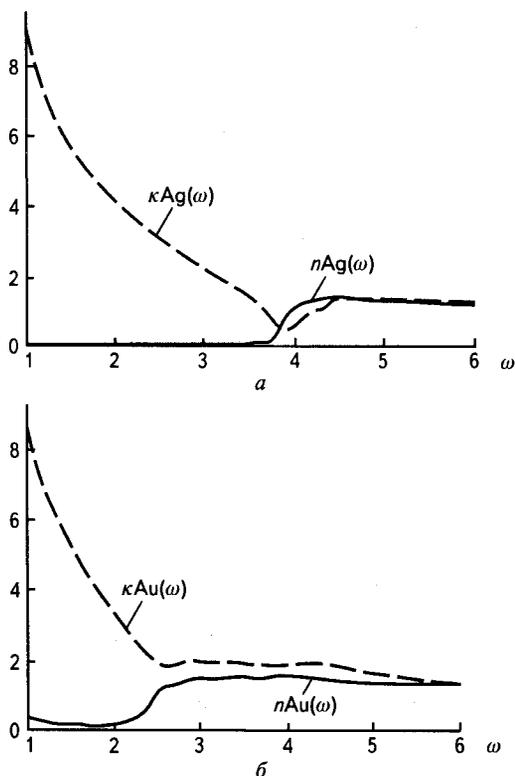


Рис. 5.4. Экспериментальные зависимости действительной (сплошная кривая) и мнимой (пунктирная) частей показателя преломления серебряной (а) и золотой (б) пленки; в зависимости от энергии фотона [8] по оси ординат отложена энергия фотона в электронвольтах

Из графиков рис. 5.4 следует, что практически во всем представленном диапазоне энергий фотонов выполняется неравенство $n_s(\omega) < \kappa_s(\omega)$, что отвечает отрицательной величине действительной части диэлектрической проницаемости. Отрицательная диэлектрическая проницаемость означает невозможность распространения электромагнитной волны в объемном образце, а также отражению излучения от среды такого рода.

Результаты расчета по формуле (5.66) действительной и мнимой частей поляризуемости серебряной наносферы, помещенной в стекло $\epsilon_m = 2,25$, с использованием данных по коэффициенту преломления серебра рис. 5.4, *a* представлены на рис. 5.5. Из рисунка следует наличие резонанса поляризуемости при энергии фотона порядка 3,1 эВ. В рамках простейшей модели, когда диэлектрическая проницаемость металла описывается плазменной формулой

$$\epsilon_s(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

(ω_p — плазменная частота), положение максимума мнимой части поляризуемости металлической сферы дается равенством, следующим из условия резонанса (5.67):

$$\omega_{\text{res}} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + 2\epsilon_m}}. \quad (5.69)$$

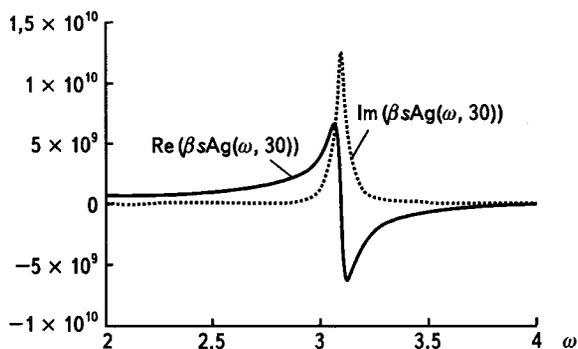


Рис. 5.5. Реальная и мнимая части поляризуемости серебряной сферы радиусом 30 нм в стеклянной матрице, абсцисса отложена в электрон-вольтах, ордината — в нм^3

При выводе равенства (5.69) предполагалось, что диэлектрическая проницаемость матрицы в рассматриваемом частотном диапазоне от частоты не зависит. Заметим, что для случая вакуума резонансная частота плазмона на поверхности сферы равна:

$$\omega_{\text{res}} = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}.$$

Для серебра $\hbar\omega_p \approx 9$ эВ, так что в случае стеклянной матрицы из (5.69) следует, что $\hbar\omega_{\text{res}} \approx 3,8$ эВ. Отличие этой величины от данных рис. 5.5 связано с тем, что плазменная формула для диэлектрической проницаемости, использованная при выводе (5.69), имеет заметную погрешность, обусловленную пренебрежением вклада связанных электронов.

Резонансное увеличение поляризуемости металлической наносферы приводит к ряду важных оптических эффектов, обусловленных ростом напряженности электрического поля в электромагнитной волне вблизи наносферы при выполнении условия (5.67). Отметим, что одним из таких эффектов является увеличение (более чем на 10 порядков) вероятности спонтанного комбинационного рассеяния света на молекулах, прикрепленных к металлическим наночастицам. Данный эффект неоднократно наблюдался экспериментально и имеет богатые перспективы практического использования.

Литература

1. *Астапенко В.А.* Приближенные методы в теории взаимодействия фотонов и электронов с атомами. М.: МФТИ, 2002, 104 с.
2. *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987, 272 с.
3. *Brandt W., Lundqvist S.* Atomic Oscillations in the Statistical Approximation. Phys. Rev. 1965. V. 139, p. A612—A617.
4. *Уланцев А.Д., Шевелько В.П.* Статическая мультипольная поляризуемость атомов и ионов в модели Томаса—Ферми. Опт. и спектр. 1988. Т. 65, с. 1003—1008.
5. *Stott M.J., Zaremba E.* Linear-response theory within the density-functional formalism: application to atomic polarizabilities. Phys. Rev. A. 1980. V. 21, p. 12—23.
6. *Король А.В., Лялин А.Г., Оболенский О.И., Соловьев А.В.* Исследование роли поляризационного механизма излучения атомов в широком диапазоне частот фотонов. ЖЭТФ, 1998. Т. 114, с. 458—473.
7. *Van de Hulst H.C.* Light scattering by small particles. NY: Dover Publications, 1981, 470 p.
8. *Johnson P.B., Chirsty R.W.* Optical constants of the noble metals. Phys. Rev. B. 1972. V. 6, pp. 4370—4379.

6.1. ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ТЕОРИЮ АТОМА

Данная глава посвящена рассмотрению излучательных явлений, которые сопровождаются переходом электрона между состояниями дискретного энергетического спектра атома. К этим явлениям относятся фотопоглощение, люминесценция (спонтанное излучение), вынужденное излучение.

Первые экспериментальные исследования фотопроцессов в дискретном спектре были осуществлены в XIX в. при регистрации линейчатых спектров излучения атома водорода. Обобщением этих исследований стала эмпирическая формула Бальмера (4.13), полученная в 1885 г., которая описывала длину волны излучения как функцию двух целых чисел и размерного параметра — постоянной Ридберга. Теоретическое обоснование формулы Бальмера было дано Н. Бором в 1913 г. с помощью полуклассической теории атома водорода (см. разд. 4.2).

На рис. 6.1 представлены результаты эксперимента по наблюдению видимой части спектра атома водорода с помощью регистрации излучения газового разряда.

Разложение в спектр, представленный на рис. 6.1, осуществлено с помощью дифракционной решетки. Видны три линии серии Бальмера: красная (головная линия, длина волны $\lambda = 656,3$ нм), голубая ($\lambda = 486,1$ нм) и синяя ($\lambda = 434,1$ нм).

Для описания фотопроцессов в дискретном спектре в рамках квантово-механического подхода необходимо сделать ряд вводных замечаний об энергетических уровнях связанных электронов в атоме.

Как уже говорилось в гл. 4, энергия связанного атомного электрона пробегает ряд «разрешенных» значений $\{E_n\}$, разделенных запрещенными интервалами энергии. Это множество значений энергии называется дискретным спектром. С классической точки зрения

дискретному энергетическому спектру соответствует финитное движение электрона по замкнутым орбитам. Состояния непрерывного спектра в классической физике отвечают инфинитному движению по «разомкнутым» траекториям, таким как парабола или гипербола.

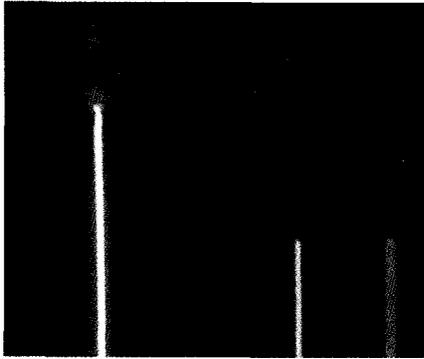


Рис. 6.1. Слева — газовый разряд в стеклянной трубке с водородом; справа — линейчатый спектр атома водорода (серия Бальмера), разрешенный с помощью дифракционной решетки 600 штрихов/мм

В рамках полуклассической теории Бора энергия связанного электрона в атоме водорода определяется условием квантования момента количества движения (4.14), (4.16) и вторым законом Ньютона (4.17). В результате применения такого подхода получается формула Бора (4.28) для энергии дискретного спектра водородоподобного атома. В общем случае многоэлектронной системы для определения разрешенных значений энергии необходимо воспользоваться формализмом квантовой механики и решить стационарное (не зависящее от времени) уравнение Шредингера

$$\hat{H}_0 \psi_i = E_i \psi_i, \quad (6.1)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан невозмущенного атома; E_i — энергия; ψ_i — волновая функция i -го состояния. С математической точки зрения равенство (6.1) представляет собой задачу на собственные функции и собственные значения. Собственными значениями в данном случае являются разрешенные уровни энергии электронов в атоме, а собственными функциями — волновые функции состояний с заданной энергией.

Напомним, что квадрат модуля волновой функции $|\psi_i(\mathbf{r})|^2$ описывает вероятность нахождения электрона в заданной точке пространства с радиусом-вектором \mathbf{r} . Если волновая функция системы известна, то с ее помощью можно вычислить все наблюдаемые величины. Поэтому определение волновой функции является ключевым моментом квантово-механического подхода к описанию взаимодействия излучения с нанобъектами.

Гамильтониан представляет собой оператор энергии и состоит из двух слагаемых, отвечающих оператору кинетической ($\hat{T} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ — для одного электрона; $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор импульса) и потенциальной \hat{U} энергии:

$$\hat{H}_0 = \hat{T} + \hat{U}.$$

Если нет внешнего нестационарного воздействия, то гамильтониан системы не зависит от времени и справедливо уравнение (6.1). Множество функций $\{\psi_i\}$, являющихся решением (6.1), образует полный ортонормированный набор. Это означает, что любую функцию можно разложить в ряд по ψ_i . Энергетический спектр $\{E_i\}$ в общем случае состоит из дискретной части и непрерывной части. Дискретная часть спектра отвечает связанным состояниям, в которых волновая функция локализована в пространстве. Непрерывный спектр соответствует делокализованным состояниям квантовой системы.

Оператор кинетической энергии в силу своего определения является сферически-симметричным, т. е.

$$\hat{T}(\mathbf{r}) = \hat{T}(|\mathbf{r}|).$$

Если таким же свойством обладает оператор потенциальной энергии (важный случай центрального поля), то волновые функции связанного электрона можно представить в виде:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = Y_{l_i m_i}(\vartheta, \varphi) R_{n_i l_i}(r), \quad (6.2)$$

где $Y_{l_i m_i}(\vartheta, \varphi)$ — шаровая функция, зависящая только от телесного угла $\Omega = (\vartheta, \varphi)$ радиуса-вектора \mathbf{r} ,

$$Y_{l_i m_i}(\vartheta, \varphi) = P_{l_i}^{(m_i)}(\cos \vartheta) \exp(im_i \varphi)$$

($P_{l_i}^{(m_i)}(x)$ — присоединенный полином Лежандра); $R_{n_i l_i}(r)$ — радиальная волновая функция, зависящая от расстояния до центра поля r ;

n_i, l_i, m_i — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа в i -м состоянии.

Из формулы (6.2) следует, что в центральном поле угловая зависимость волновой функции *универсальна*, а радиальная функция определяется зависимостью $\hat{U}(r)$ и может быть найдена с помощью решения радиального уравнения Шредингера. Это уравнение получается после подстановки функции (6.2) в равенство (6.1) и имеет следующий вид [1]

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{n,l_i}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_i - U(r) - \frac{\hbar^2 l_i(l_i + 1)}{2mr^2} \right] R_{n,l_i} = 0. \quad (6.3)$$

Добавка к потенциальной энергии в квадратных скобках левой части этого равенства, пропорциональная множителю $l_i(l_i + 1)$, называется *центробежной энергией*. Вклад центробежной энергии доминирует над кулоновской энергией на малых расстояниях от атомного ядра, если орбитальный момент электрона не равен нулю $l_i \neq 0$.

В случае водородоподобного атома, когда

$$U = -\frac{Ze^2}{r},$$

решение (6.3), ограниченное на бесконечности (локализованное или связанное состояние), выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1(l + 1 - n, 2l + 2, 2r/n)$, явный вид которой нам не потребуется. Приведем нормированные радиальные водородоподобные функции состояний с $n = 1(l = 0), 2(l = 0, 1)$:

$$\begin{aligned} R_{10} &= \frac{2}{a_B^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right); \\ R_{20} &= \frac{1}{a_B^{3/2} \sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_B}\right); \\ R_{21} &= \frac{r}{2\sqrt{6} a_B^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a_B}\right), \end{aligned} \quad (6.4)$$

где $a_B \approx 0,529 \cdot 10^{-8}$ см — радиус Бора (4.19).

Радиальное распределение электронной плотности в заданном состоянии определяется радиальной волновой функцией и равно

$$\rho_{nl}(r) = r^2 |R_{nl}(r)|^2.$$

На рис. 6.2 представлены распределения радиальной плотности электрона в атоме водорода, отвечающие функциям (6.4).

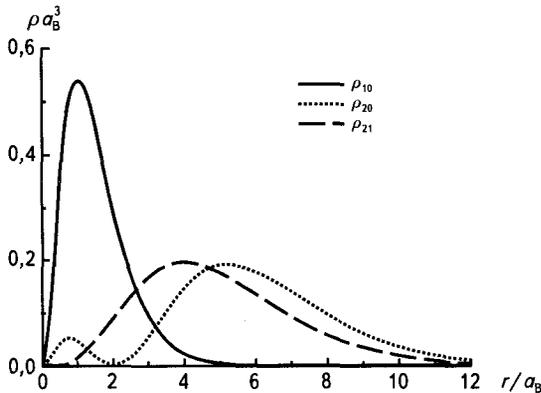


Рис. 6.2. Распределение электронной плотности в атоме водорода в трех состояниях с наименьшей энергией

Видно, что состояние с наименьшим главным квантовым числом $n = 1$ локализовано ближе к ядру, чем состояния с $n = 2$, причем максимум функции $\rho_{10}(r)$ приходится на расстояние до ядра, равное борвскому радиусу:

$$r_{\max}^{(1s)} = a_B.$$

Можно показать, что в атоме водорода

$$r_{\max}^{(n, l=n-1)} = n^2 a_B,$$

т. е. максимум распределения электронной плотности состояний с максимально возможным орбитальным моментом $l_{\max} = n - 1$ совпадает с радиусом круговой орбиты электрона в полуклассической модели Бора (4.19). В этом проявляется численное соответствие полуклассической и квантовой теории атома водорода.

Более существенное соответствие теории Бора и квантового рассмотрения проявляется при сравнении уровней энергии связанных состояний электрона. Можно показать, что собственные значения энергии в уравнении Шредингера для атома водорода описываются формулой Бора (4.28).

В случае центрального поля общего вида, как это имеет место в многоэлектронных атомах, для определения радиальных волновых

функций атомных электронов нужно решать соответствующее уравнение Шредингера численно или использовать различные приближенные методы. Уровни энергии связанных состояний в ряде случаев могут быть определены из эксперимента.

6.2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Последовательное описание излучательных процессов в не слишком сильном электромагнитном поле, когда выполняются неравенства (1.9), базируется на использовании квантово-механической теории возмущений. Полностью квантовое описание электромагнитного взаимодействия, когда учитывается квантование поля и вещества, является предметом квантовой электродинамики. Этот вопрос здесь рассматриваться не будет. Другой, более простой подход, называемый *полуклассическим*, основан на классическом описании поля и квантовом описании вещества. Для использования полуклассического подхода необходимо установить вид оператора взаимодействия излучения с заряженными частицами. Исходим из классического выражения для энергии заряда в электромагнитном поле

$$V = e\varphi - \frac{e}{c}vA, \quad (6.5)$$

где e — заряд частицы; v — ее скорость; φ , A — скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля.

При переходе к квантово-механическому описанию в рамках полуклассического подхода нужно произвести замену

$$v \rightarrow \frac{\hat{p}}{m},$$

где \hat{p} — оператор импульса; m — масса частицы. В аксиальной калибровке электромагнитного потенциала ($\varphi = 0$) из формулы (6.5) получаем для оператора взаимодействия заряда и поля:

$$\hat{V} = -\frac{e}{2mc}(\hat{p}A + A\hat{p}). \quad (6.6)$$

При записи (6.6) учтена некоммутативность оператора импульса и векторного потенциала. Эта некоммутативность исчезает в дипольном приближении, когда зависимость векторного потенциала от

координаты можно пренебречь, а также в случае свободного поля (без зарядов) при использовании калибровки, в которой $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$. Тогда вместо (6.6) имеем:

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{A}. \quad (6.7)$$

Оператор (6.6), (6.7) называется оператором электромагнитного взаимодействия в форме импульса (или скорости). Часто используется другая запись этого оператора (в форме длины):

$$\hat{V} = -e\mathbf{r}\mathbf{E} = -d\mathbf{E}. \quad (6.8)$$

Приведенные формы оператора электромагнитного взаимодействия эквивалентны в случае расчетов с точными волновыми функциями. На практике, как правило, используются приближенные волновые функции, тогда операторы (6.7) и (6.8) приводят, вообще говоря, к различным результатам. Предпочтительность использования одного из них определяется в каждом конкретном случае в зависимости от специфики рассматриваемой задачи.

В основе теории возмущений лежит предположение о том, что гамильтониан квантовой системы представим в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (6.9)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан без учета электромагнитного взаимодействия; \hat{V} — оператор возмущения, который при выполнении условий (1.9) является *малой добавкой* к исходному гамильтониану \hat{H}_0 . Волновые функции невозмущенного гамильтониана удовлетворяют нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_i}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_i. \quad (6.10)$$

В отличие от стационарного уравнения Шредингера (6.1) в уравнении (6.10) предполагается, что волновые функции Ψ_i зависят от времени. В дальнейшем предполагаем, что гамильтониан \hat{H}_0 не зависит от времени. Тогда решения (6.10) можно записать в виде:

$$\Psi_i(\mathbf{r}, t) = \psi_i(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_i t}{\hbar}\right), \quad (6.11)$$

где функции ψ_i являются решениями стационарного уравнения (6.1).

В рамках полуклассического подхода оператор электромагнитного взаимодействия \hat{V} дается формулами (6.6)–(6.8), в которых вектор-потенциал и напряженность электрического поля являются классическими величинами. Возмущенная волновая функция квантовой системы Ψ удовлетворяет уравнению, аналогичному (6.10) с гамильтонианом (6.9). Она может быть разложена в ряд по собственным функциям невозмущенного гамильтониана в силу полноты системы функций $\{\psi_i\}$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_i t}{\hbar}\right). \quad (6.12)$$

Таким образом, искомая волновая функция полностью определяется набором зависящих от времени комплексных коэффициентов $c_i(t)$. Для их определения подставим разложение (6.12) в соответствующее временное уравнение Шредингера, откуда можно получить равенство [2]:

$$i\hbar \frac{\partial c_k}{\partial t} = \sum_i V_{ki} \exp(i\omega_{ki} t) c_i, \quad (6.13)$$

где

$$V_{ki} = \langle k | \hat{V} | i \rangle \equiv \int \psi_k^* \hat{V} \psi_i d\mathbf{r} \quad (6.14)$$

зависящий от времени матричный элемент оператора электромагнитного взаимодействия,

$$\omega_{ki} = \frac{E_k - E_i}{\hbar}.$$

При выводе уравнения (6.13) было использовано (6.10). Интегрируя (6.13) по времени, находим:

$$c_k(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_i \int_{-\infty}^t V_{ki}(t') c_i(t') \exp(i\omega_{ki} t') dt'. \quad (6.15)$$

Полученное соотношение представляет собой интегральное уравнения на коэффициенты $c_i(t)$. В рамках теории возмущений это уравнение решается итерационным способом с использованием относительной малости матричного элемента V_{ki} .

Предположим, что до электромагнитного воздействия (при $t \rightarrow -\infty$) система находилась в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_n . Тогда для вычисления коэффициента c_k в первом порядке теории возмущений в правой части уравнения (6.15) функции $c_i(t)$ нужно заменить на символ Кронекера δ_{in} . В результате находим:

$$c_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn}(t') \exp(i\omega_{kn}t') dt'. \quad (6.16)$$

Коэффициент (6.16) представляет собой (с точностью до множителя) мгновенное значение *амплитуды* перехода квантовой системы из состояния $|n\rangle$ в состояние $|k\rangle$, вычисленное в первом порядке малости по возмущению. Амплитуда перехода является, вообще говоря, комплексной величиной, аргумент которой несет информацию о фазе взаимодействия. Фазовая характеристика состояния вещества является важной специфической чертой квантового описания, которая отсутствует в классической физике. Фаза состояния отражает корпускулярно-волновой дуализм, свойственный объектам микромира. Учет фазовых соотношений очень существенен при рассмотрении так называемых когерентных излучательных процессов, а также при воздействии на вещество сверхкоротких импульсов электромагнитного поля (см. ниже).

6.3. ФОТОПРОЦЕССЫ В МОНОХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Пусть электромагнитное возмущение вызвано действием *монохроматического* излучения. Воспользуемся оператором этого возмущения в форме длины (6.8). С учетом выражения для напряженности электрического поля в монохроматическом излучении (1.5) матричный элемент V_{kn} переписется в виде:

$$V_{kn} = \tilde{V}_{kn} \exp(-i\omega t) + \tilde{V}_{kn}^* \exp(i\omega t), \quad (6.17)$$

где \tilde{V}_{kn} — матричный элемент оператора взаимодействия с выделенной временной зависимостью,

$$\tilde{V}_{kn} = -\mathbf{d}_{kn} \frac{\mathbf{E}_0}{2} \exp(-i\varphi_0); \quad (6.18)$$

d_{kn} — матричный элемент оператора электрического дипольного момента,

$$d_{kn} = \langle k | \hat{d} | n \rangle.$$

При записи (6.18) предполагался выполненным критерий дипольного приближения (1.4). Подставляя (6.17) в (6.16), получаем в пределе $t \rightarrow \infty$:

$$c_{kn}^{(1)}(t \rightarrow \infty) \rightarrow -\frac{2\pi i}{\hbar} \left\{ \vec{V}_{kn} \delta(\omega_{kn} - \omega) + \vec{V}_{kn}^* \delta(\omega_{kn} + \omega) \right\}. \quad (6.19)$$

При выводе (6.19) было использовано интегральное представление дельта-функции:

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\alpha t) dt. \quad (6.20)$$

Дельта-функции в фигурных скобках правой части выражения (6.19) описывают закон сохранения энергии, поэтому первое слагаемое соответствует *поглощению* фотона с энергией $\hbar\omega$, а второе — *излучению* фотона той же частоты.

В соответствии с базовым квантово-механическим формализмом *вероятность в единицу времени* перехода системы из начального состояния $|n\rangle$ в конечное состояние $|k\rangle$ дается соотношением:

$$w_{kn} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|c_{kn}(t)|}{t}. \quad (6.21)$$

Подставляя в это равенство выражение (6.19), находим для *фотопоглощения*:

$$w_{kn}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_k - E_n - \hbar\omega) |\vec{V}_{kn}|^2. \quad (6.22)$$

Здесь использована формула $2\pi\delta^2(x) = t\delta(x)$, вытекающая из интегрального представления дельта-функции (6.20), а также соотношение

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}.$$

Выражение (6.22), связывающее вероятность процесса в единицу времени с матричным элементом оператора взаимодействия, на-



зывается *золотым правилом Ферми*. Золотое правило Ферми описывает не только фотопроцессы, но и переходы в квантовой системе под действием возмущения любой природы.

Из формулы (6.22) следует, что вероятность фотопоглощения отлична от нуля в случае выполнения условия $E_k - E_n = \hbar\omega$, т. е. когда энергия поглощаемого фотона равна энергии перехода в атоме. Последнее равенство свидетельствует об *однофотонном* характере описываемого явления.

Вероятность в единицу времени *излучения* фотона под действием внешнего электромагнитного поля дается формулой, аналогичной (6.22) с заменой знака у частоты $-\hbar\omega \rightarrow \hbar\omega$. Тогда, естественно, энергия начального состояния атома должна быть выше энергии конечного состояния $E_n > E_k$. Это излучение называется *стимулированным*, или индуцированным. Используется также термин *вынужденное* излучение.

Понятие вынужденного излучения было введено в квантовую теорию А.Эйнштейном в статье 1916 г., в которой рассматривалось взаимодействие теплового излучения с двухуровневой системой (см. разд. 4.1). В цитируемой работе вынужденное излучение описывалось с помощью феноменологического коэффициента B_{nm} , явный вид которого последовательным путем может быть получен только в рамках квантовой механики.

Стимулированное излучение используется в лазерах и мазерах для усиления электромагнитного поля. Напомним, что вышеприведенные термины являются аббревиатурами английских словосочетаний: «Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation» и «Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation».

Процессы фотопоглощения и стимулированного излучения схематически представлены на рис. 6.3 вместе с процессом спонтанного излучения, о котором речь пойдет ниже.

Важнейшим свойством стимулированного излучения, определяющим его широкое использование, является то обстоятельство, что излученный фотон по всем своим характеристикам (частоте, волновому вектору, поляризации, фазе) *неотличим* от фотона внешнего поля, вызывающего излучательный переход в атоме. (Здесь мы пренебрегаем тонкими эффектами, связанными с явлением отдачи.) Эта неразличимость приводит к тому, что электромагнитные поля обоих фотонов конструктивно интерферируют с увеличением амплитуды и сохранением фазы суммарного поля. В результате формируется когерентное излучение с высокой спектральной яркостью.

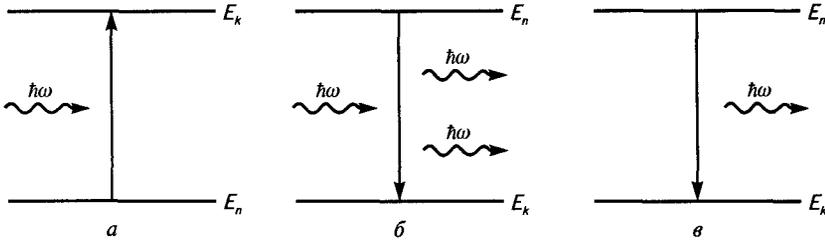


Рис. 6.3. Фотопоглощение (а), вынужденное излучение (б) и спонтанное излучение (в)

Дельта-функция в правой части равенства (6.22) выражает закон сохранения энергии в пренебрежении взаимодействия атома с окружением (термостатом). Для учета этого взаимодействия в формуле (6.22) нужно произвести замену:

$$\delta(\Delta E_{nk} - \hbar\omega) \rightarrow \frac{G_{nk}(\omega)}{\hbar}, \quad (6.23)$$

где $G_{nk}(\omega)$ — спектральная форма (профиль) линии на переходе $n \leftrightarrow k$ между атомными состояниями, подробно рассмотренная в разд. 4.5. Спектральная форма линии учитывает не только неупругое взаимодействие атома с термостатом, в ходе которого изменяется энергия системы, но и упругие процессы, играющие важную роль в формировании спектрального профиля перехода, поскольку их вероятность, как правило, больше, чем неупругих.

Производя замену (6.23) и подставляя в (6.22) выражение для матричного элемента взаимодействия атома с монохроматическим электромагнитным полем (6.18), получаем для вероятности в единицу времени однофотонного процесса (поглощения или индуцированного излучения) следующее равенство:

$$w_{fi}^{(1)} = \frac{4\pi^2}{3g_i \hbar^2} G_{fi}(\omega) |\mathbf{d}_{fi}|^2 u, \quad (6.24)$$

где u — пространственная плотность энергии монохроматического излучения:

$$u = \frac{E_0^2}{8\pi};$$

g_i — статистический вес начального уровня энергии, учитывающий его возможное вырождение. Отсюда следует выражение для сечения однофотонного процесса:

$$\sigma_{fi} = \frac{4\pi^2 |\omega_{fi}|}{3g_i \hbar c} G_{fi}(\omega) |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (6.25)$$

При выводе (6.25) было использовано определение сечения (4.92) и выражение для потока фотонов в монохроматическом излучении

$$j_{\omega}^{\text{ph}} = \frac{c u}{\hbar \omega}.$$

Равенство (6.25) совпадает с выражением для сечения (4.95), полученным на основании принципа соответствия.

Из формул (6.24) и (6.25) следует, что вероятность/сечение фотопоглощения тем больше, чем больше матричный элемент дипольного момента перехода, который предполагается неравным нулю $\mathbf{d}_{fi} \neq 0$ (дипольно-разрешенный переход). Частотная зависимость фотопоглощения в монохроматическом поле определяется спектральной формой линии перехода и имеет острый максимум на собственной частоте $\omega_{\text{max}} = \omega_{fi}$ (см. рис. 4.2). Кроме того, из формулы (6.24) видна важная характеристическая черта однофотонного процесса: пропорциональность его вероятности энергии излучения в *первой* степени.

Выражение для вероятности однофотонного процесса (6.24) легко обобщить на случай немонохроматического излучения. Для этого пространственную плотность энергии поля u нужно заменить на спектральную плотность энергии $\rho(\omega)$:

$$\frac{d w_{fi}^{(1)}}{d\omega} = \frac{4\pi^2}{3g_i \hbar^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2 G_{fi}(\omega) \rho(\omega). \quad (6.26)$$

Здесь введена дифференциальная (по частоте внешнего поля) вероятность в единицу времени. Отсюда для интегральной (по частоте излучения) вероятности процесса имеем

$$w_{fi}^{(1)} = \frac{4\pi^2}{3g_i \hbar^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \int_0^{\infty} G_{fi}(\omega') \rho(\omega') d\omega'. \quad (6.27)$$

Очевидно, что (6.27) переходит в (6.24) для монохроматического излучения, когда

$$\rho(\omega') = u\delta(\omega - \omega').$$

Отметим, что формулы (6.24)—(6.27) описывают как фотопоглощение, так и стимулированное излучение. В последнем случае предполагается, что $E_i - E_f \approx \hbar\omega$, т. е. энергия начального атомного состояния больше энергии конечного.

Спонтанное излучение (рис. 6.3, в) в отличие от индуцированного (в рамках полуклассического описания) возникает самопроизвольно без видимой внешней причины. Его характеристики, такие как фаза, поляризация и направление излучения, носят случайный характер, а частота определяется формой линии атомного перехода (см. рис. 4.4). На самом деле с помощью квантовой электродинамики можно показать, что спонтанное излучение возникает под действием вакуумных флуктуаций электромагнитного поля, как об этом говорилось в конце разд. 4.4. Интерпретация спонтанного излучения как индуцированного вакуумными флуктуациями позволяет получить для дифференциальной (по частоте) вероятности этого процесса явное выражение. С этой целью в формулу (6.26) нужно подставить спектральную плотность энергии вакуумных флуктуаций (4.68), в результате находим:

$$\frac{dw_{fi}^{(sp)}}{d\omega} = \frac{4\omega_{fi}^3}{3g_i\hbar c^3} |d_{fi}|^2 G_{fi}(\omega). \quad (6.28)$$

При записи (6.28) было положено $\omega = \omega_{fi}$, что обусловлено острым максимумом спектральной формы линии на собственной частоте перехода.

Таким образом, спектральная форма линии атомного перехода описывает не только фотопоглощение, но также и излучение фотона, как индуцированное, так и спонтанное.

Из дифференциальной вероятности спонтанного излучения легко получить интегральную вероятность, если проинтегрировать (6.28) по частоте и воспользоваться нормировкой функции $G_{fi}(\omega)$:

$$\int_0^{\infty} G_{fi}(\omega) d\omega = 1.$$

Указанное интегрирование дает

$$w_{fi}^{(sp)} = \frac{4\omega_{fi}^3}{3g_i \hbar c^3} |d_{fi}|^2 = A_{fi}. \quad (6.29)$$

Второе равенство в (6.29) следует из формулы для коэффициента Эйнштейна (4.59), полученной с помощью спектроскопического принципа соответствия и явного выражения для силы осциллятора (4.51). Заметим, что формула (4.51) была приведена в гл. 4 без обоснования, которое возможно получить только в рамках квантовой механики, что и было сделано выше.

Из выражения (6.29) следует, что вероятность спонтанного излучения пропорциональна третьей степени собственной частоты перехода. Поэтому данный процесс доминирует над другими возможными каналами распада возбужденных состояний атомных частиц в относительно высокочастотном спектральном диапазоне: ближнем инфракрасном, видимом и более коротковолновом. В радиодиапазоне роль спонтанного излучения пренебрежимо мала. Сильная зависимость коэффициента Эйнштейна A_{fi} от частоты является одним из основных факторов, затрудняющих создание рентгеновского лазера на переходах в дискретном спектре многозарядных ионов, поскольку препятствует созданию инверсии населенностей, необходимой для усиления излучения.

Спонтанное излучение при нетепловом возбуждении вещества проявляется как *люминесценция* — известное с XVIII в. физическое явление, нашедшее в настоящее время широкое практическое использование, в частности в люминесцентных лампах и биомаркерах. Определение люминесценции было дано в 1948 г. С.И. Вавиловым: «Будем называть люминесценцией избыток над температурным излучением тела в том случае, если это избыточное излучение обладает конечной длительностью примерно 10^{-10} секунд и больше» [3]. Временной критерий в этом определении позволяет отличать люминесценцию от других типов излучательных процессов: различных видов рассеяния света, излучения Вавилова—Черенкова и т. д., длительность которых существенно меньше периода колебания электромагнитного поля. В зависимости от способа возбуждения различают фотолюминесценцию (возбуждение светом), хемилюминесценцию (химическое возбуждение), катодолюминесценцию (возбуждение быстрыми заряженными частицами), сонолюминесценцию (возбуждением звуком) и др.

Временная зависимость мощности люминесценции, возникающей на переходе $j \rightarrow k$, дается выражением

$$Q_{j \rightarrow k}(t) = A_{kj} \hbar \omega_{jk} N_j(t=0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_j}\right), \quad (6.30)$$

где τ_j — время жизни j -го уровня; ω_{jk} , A_{kj} — собственная частота и коэффициент Эйнштейна для рассматриваемого перехода; $N_j(t=0)$ — населенность уровня в начальный момент времени. Суммарная по всем переходам на нижележащие уровни мощность люминесценции равна

$$Q_j(t) = \sum_k Q_{j \rightarrow k}(t) = \left\{ \sum_k A_{kj} \hbar \omega_{jk} \right\} N_j(t=0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_j}\right). \quad (6.31)$$

Из данного выражения следует, что временная зависимость сигнала люминесценции определяется только временем жизни верхнего уровня, поэтому она может служить для определения параметра τ_j . Формулы (6.30) и (6.31) получены в пренебрежении длительностью возбуждающего импульса.

Важными количественными характеристиками фотолюминесценции являются квантовый и энергетический выход. Первый из них равен отношению числа возбуждающих люминесценцию фотонов к числу излученных фотонов, второй — отношению энергии возбуждения к энергии излучения. Энергетический выход люминесценции линейно растет с ростом длины волны и при достижении некоторого граничного значения, определяемого законом сохранения энергии

$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi c}{(\omega_{kj})_{\min}},$$

резко падает.

6.4. НАНОМАРКЕРЫ НА КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Одним из современных применений люминесценции является ее использование в *наномаркерах* (флуоресцентных метках) для биологических и медицинских целей [4]. Наномаркеры представляют собой объекты с характерным размером от единиц до десятков нанометров, способные присоединяться к целевым макро-



молекулам, например клеткам с различного рода патологиями, и отслеживать их перемещение в пространстве с помощью возбуждаемой внешним излучением люминесценции. Одной из реализаций наномаркеров являются *квантовые точки* (или нанокристаллы) — полупроводниковые наночастицы размером от нескольких нанометров до сотни нанометров. Квантовые точки состоят из атомов элементов II—VI или III—V групп периодической таблицы Менделеева и имеют размер меньше радиуса экситона Бора для данного материала:

$$d < \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_{\text{exc}} e^2},$$

где ϵ — диэлектрическая проницаемость вещества; m_{exc} — эффективная масса экситона. В случае сферических частиц селенида кадмия CdSe их диаметр должен быть меньше 10 нм, чтобы удовлетворять приведенному неравенству.

Экситон представляет собой связанное состояние электрона и дырки в полупроводнике. Для описания экситонов большого радиуса справедлива водородоподобная модель, в которой заряд электрона нужно уменьшить в $\sqrt{\epsilon}$ раз (ϵ — диэлектрическая проницаемость полупроводника), а массу электрона заменить на эффективную массу экситона. С учетом этих замен можно использовать формулы теории Бора, приведенные в разд. 4.2 настоящей книги. В частности, для макроскопических образцов «работает» формула Бора (4.28) для уровней энергии экситона, в которой энергетическая постоянная Ридберга должна быть заменена на свой аналог (эффективный Ридберг):

$$Ry^* = \frac{Ry}{\epsilon^2} \frac{m_{\text{exc}}}{m}.$$

При переходе от объемных образцов к полупроводниковым нанокристаллам нужно учитывать размерный эффект: зависимость энергии от диаметра нанокристалла — размерное квантование энергии. Размерное квантование (или квантовый конфайнмент) характерно для нанокристаллов с радиусом несколько нанометров. В квантовых точках диаметром несколько десятков нанометров энергия элементарных возбуждений перестает зависеть от радиуса.

Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек определяются спектром возбуждения носителей заряда, который в свою

очередь зависит от размера квантовой точки из-за размерного квантования энергии. Экспериментальный спектр поглощения квантовых точек селенида кадмия различного диаметра, измеренный при температуре 10 К, представлен на рис. 6.4. Видно, что с увеличением размера нанокристалла максимум фотопоглощения, отвечающий переходу между дискретными состояниями экситонного спектра, сдвигается в длинноволновый диапазон. При этом для диаметров $d > 10$ нм пик фотопоглощения исчезает, и спектр описывается монотонно возрастающей (с уменьшением длины волны) кривой.

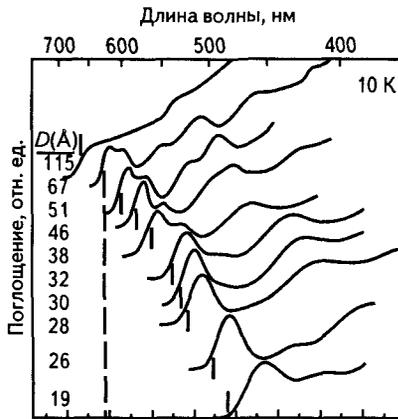


Рис. 6.4. Эволюция спектра поглощения нанокристаллов CdSe, внедренных в оптически прозрачную полимерную пленку, при изменении их диаметра (из статьи [5])

Зависимость собственной частоты радиационного перехода от размера нанокристалла приводит к неоднородному уширению линии (4.72) в ансамбле квантовых точек из-за разброса их радиусов. В ряде случаев это неоднородное уширение может оказаться больше неоднородного уширения (4.70), связанного со сбоем фазы элементарного излучателя. Тогда оказывается возможным использовать методику эхо-спектроскопии (см. гл. 10) в работе с полупроводниковыми квантовыми точками.

По данным ультрафиолетовой спектроскопии, в квантовых точках обнаружено большое количество уровней энергии и соответственно значительное число радиационных переходов. Самый низкий возбужденный уровень энергии отвечает экситонному пику в

поглощении и излучении. Выше по энергии лежат мультиплетные состояния с богатой структурой, что обеспечивает возможность эффективного возбуждения квантовых точек коротковолновым излучением. Коэффициент поглощения излучения в нанокристаллах возрастает с уменьшением длины волны. Это позволяет возбуждать квантовые точки с различной длиной волны люминесценции одним источником излучения (например, ртутной лампой), что крайне важно для биологических приложений.

Флуоресценция в квантовых точках обусловлена фоторекомбинацией свободных и связанных носителей заряда. В первом случае, называемом экситонным, ширина спектра излучения весьма мала. Так, например, ширина спектра излучения одиночного нанокристалла CdSe с оболочкой из ZnS составляет 13 нм при комнатной температуре.

Характерное время жизни возбужденных состояний в квантовых точках (20—30 нс) существенно меньше, чем у редкоземельных ионов (0,1—1 мс), но больше времени жизни возбуждений в органических красителях (1—5 нс). Исследования показали, что временная зависимость затухания люминесценции в полупроводниковых нанокристаллах носит многоэкспоненциальный характер и зависит от интенсивности излучения.

Отличительными чертами квантовых точек, важными для их биомедицинских применений, является высокий квантовый выход (выше 70 %), химическая и фотостабильность, широкая спектральная полоса возбуждения (от ближней ИК-области до УФ-диапазона), однозначная связь между длиной волны люминесценции и диаметром, узкий спектр (ширина 20—25 нм) и симметричная форма линии люминесценции. Нанокристаллы селенида кадмия, например, диаметром от 3—6 нм возбуждаются излучением одной и той же длины волны, излучая при этом фотоны на длинах волн от ближнего ИК- до УФ-диапазона в зависимости от своего диаметра (табл. 6.1 [4]). Квантовые точки оказываются на много порядков более стабильными, чем лучшие органические флуорофоры, обеспечивая как возможность многократного увеличения мощности возбуждающего излучения, так и длительности (от сотен до тысяч часов) отслеживания поведения метки в реальном времени.

Полупроводниковым нанокристаллам присущи два основных достоинства, выгодно отличающие их от органических флуорофос-

форов. Это, во-первых, возможность управления длиной волны люминесценции за счет изменения диаметра нанокристалла. И, во-вторых, широкая полоса возбуждения люминесценции, позволяющая использовать единый источник для нанокристаллов различных размеров. При этом длина волны возбуждения далеко отстоит от длины волны люминесценции более чем на 100 нм (большой стоксов сдвиг). Эта особенность важна при использовании нанокристаллов для меченя объектов, обладающих собственной флуоресценцией. Большая спектральная разница в длинах волн возбуждения и люминесценции позволяет существенно повысить селективность регистрации полезного сигнала и соответственно понизить порог обнаружения меченого объекта.

Таблица 6.1. Спектральные свойства материалов квантовых точек

Материал нанокристалла	Оптический диапазон эмиссии, нм	Материал нанокристалла	Оптический диапазон эмиссии, нм
ZnS	300—380	CdTe	600—1000
CdS	380—460	InP	650—750
ZnSe	360—500	PbS	700—1600
CdSe	480—660	InAs	830—1350

В биологических приложениях широко используется коллоидный полупроводниковый нанокристалл селенида кадмия, покрытый оболочкой из ZnS. Оболочка из широкозонного полупроводника ZnS препятствует безызлучательной диссипации энергии, обеспечивая высокий квантовый выход в различных внешних условиях.

Уникальные оптические свойства полупроводниковых квантовых точек позволяют их использовать как в *in vivo*, так и в *in vitro* экспериментах в разнообразных биологических и медицинских исследованиях, в которых применение традиционных органических флуорофоров ограничено недостаточной фотостабильностью и невозможностью одновременного детектирования в многопараметрических системах. Возможность приготовления водорастворимых флуоресцентных нанокристаллов и их конъюгатов со специфическими биологическими молекулами, способными с высокой селектив-

ностью связываться с заданными мишенями, ведет к многообещающим применениям нанокристаллов в мечении клеточных объектов. С их помощью можно получать изображение глубоко залегающих тканей, детектировать заданные молекулы в тестовых и диагностических системах, а также использовать нанокристаллы в качестве доноров в системах с резонансной передачей энергии. Одним из достижений в рассматриваемой области является демонстрация возможности создания наносенсоров с высокой эффективностью (около 100%), которые используют эффект ферстеровского резонансного переноса энергии между нанокристаллами различного диаметра.

Изменяя состав и размеры квантовых точек, удается получить флуоресценцию в широком спектральном диапазоне от ближнего инфракрасного до синего (см. табл. 6.1). Поляризация излучения полупроводниковых нанокристаллов зависит от их формы. Вытянутые образцы (квантовые стержни) дают линейно поляризованное излучение. Флуоресценция сферических образцов селенида кадмия неполяризована или имеет циркулярную поляризацию.

Квантовый выход излучения нанокристаллов при комнатной температуре примерно такой же или несколько меньше квантового выхода органических красителей, таких как родамин 6Ж или флуоресцеин. При этом, однако, сечение радиационного перехода в квантовых точках заметно выше, а фототушение люминесценции существенно меньше. В результате свечение нанокристалла из селенида кадмия с оболочкой из сульфида цинка оказывается примерно в 20 раз более ярким, чем свечение органических красителей, а фотостабильность на два-три порядка более высокой.

Дальнейшие исследования в области флуоресцентных наномаркеров облегчаются появлением коммерчески доступных гидрофобных и водорастворимых нанокристаллов высокого качества, производимых отечественными и зарубежными нанотехнологическими компаниями (Нанофлуоресцентные технологии, Quantum Dots Corporation, Evidentech Technologies). Ключевыми моментами, обусловившими возможность применения квантовых точек в биологии и медицине, явились развитие методов синтеза больших количеств эффективно люминесцирующих нанокристаллов, достижения в химии их поверхности, разработка методов приготовления водорастворимых и совместимых с биологическими объектами нанокристал-

лов, а также методов введения квантовых точек различных цветов (диаметров) для многоцветного спектрального кодирования биологических молекул.

6.5. ДВУХ- И МНОГОФОТОННЫЕ ПРОЦЕССЫ

Перейдем к описанию двухфотонных процессов в монохроматическом электромагнитном поле в рамках теории возмущений. Чтобы найти выражение для вероятности перехода во втором порядке малости по оператору электромагнитного взаимодействия, подставим в правую часть уравнения (6.15) коэффициент $c_{ni}^{(1)}(t)$ (6.16), вычисленный в первом порядке по возмущению \hat{V} . В результате получаем:

$$c_{fi}^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp(i\omega_{fn}t' + i\omega_{ni}t'') V_{fn}(t') V_{ni}(t''). \quad (6.32)$$

Воспользуемся теперь формулой (6.17) для матричного элемента оператора электромагнитного взаимодействия квантовой системы с монохроматическим излучением. Напомним, что первое слагаемое в правой части равенства (6.17), называемое положительно-частотным, отвечает поглощению фотона, второе отрицательно-частотное слагаемое отвечает излучению фотона. Таким образом, для описания *поглощения двух фотонов* в формулу (6.32) нужно подставить положительно-частотные части входящих в нее матричных элементов оператора \hat{V} . Производя указанное действие и устремляя время t к бесконечности, находим:

$$c_{fi}^{(2\text{abs})} = \frac{2\pi i}{\hbar} \delta(\omega_{fi} - 2\omega) \sum_n \frac{\tilde{V}_{fn} \tilde{V}_{ni}}{\hbar(\omega_{ni} - \omega - i0)}. \quad (6.33)$$

При выводе (6.33) было проинтегрировано по временам t' и t'' . Интегрирование по t'' привело к появлению знаменателя дроби под знаком суммы по *промежуточным состояниям* квантовой системы $|n\rangle$. Для взятия этого интеграла потребовалось ввести бесконечно малую добавку, обеспечивающую сходимость интеграла на нижнем пределе, которая и фигурирует в знаменателе (6.33). Взятие

интеграла по времени t' привело к появлению дельта-функции в соответствии с формулой (6.20). Аргумент дельта-функции отвечает закону сохранения энергии при двухфотонном поглощении. Сумму по промежуточным состояниям в (6.33) можно представить в виде:

$$\sum_n \frac{\tilde{V}_{fn} \tilde{V}_{ni}}{\hbar(\omega_{ni} - \omega - i0)} = \langle f | \hat{V} G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle, \quad (6.34)$$

где $G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина квантовой системы (не путать с функцией формы линии!),

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}')}{E_n - E - i0}, \quad (6.35)$$

ψ_n — собственные функции невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 [см. (6.1)]. Функция Грина удовлетворяет уравнению:

$$(\hat{H}_0 - E)G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.36)$$

которое является следствием полноты системы функций ψ_n . Функция Грина называется также *пропагатором*, поскольку в рамках диаграммного формализма (см. ниже) описывает распространение квантовой системы из одной точки пространства в другую. Подставляя (6.34) в (6.33), получаем

$$c_{fi}^{(2\text{abs})} = \frac{2\pi i}{\hbar} \delta(\omega_{fi} - 2\omega) \langle f | \hat{V} G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle. \quad (6.37)$$

С помощью (6.37) в полной аналогии с тем, как это делалось для однофотонного процесса, находим для вероятности в единицу времени двухфотонного поглощения монохроматического излучения следующее выражение:

$$w_{fi}^{(2\text{abs})} = 2\pi \delta(\omega_{fi} - 2\omega) \left| \frac{\langle f | \hat{V} G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle}{\hbar} \right|^2. \quad (6.38)$$

Переходя от дельта-функции к функции формы линии, запишем (6.38) в виде:

$$w_{fi}^{(2\text{abs})} = 2\pi G_{fi}(2\omega) \left| A_{fi}^{(2\text{abs})} \right|^2, \quad (6.39)$$

где $A_{fi}^{(2\text{abs})}$ — амплитуда двухфотонного поглощения,

$$A_{fi}^{(2\text{abs})} = \frac{\langle f | \hat{V} G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle}{\hbar} = \sum_n \frac{\tilde{V}_{fn} \tilde{V}_{ni}}{\hbar^2 (\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni})}. \quad (6.40)$$

Здесь введены константы затухания осцилляторов переходов γ_{ni} .

Двухфотонное излучение отвечает учету отрицательно-частотных членов в выражении для матричных элементов V_{jn} (6.17), фигурирующих в правой части равенства (6.32). Поэтому соответствующие формулы можно получить, просто произведя замену $\omega \rightarrow -\omega$ в равенствах (6.39), (6.40). В результате имеем для вероятности в единицу времени *двухфотонного вынужденного излучения*:

$$w_{fi}^{(2\text{em})} = 2\pi G_{fi}(-2\omega) |A_{fi}^{(2\text{em})}|^2, \quad (6.41)$$

где $A_{fi}^{(2\text{em})}$ — амплитуда двухфотонного излучения,

$$A_{fi}^{(2\text{em})} = \frac{\langle f | \hat{V}^* G(E_i - \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle}{\hbar} = \sum_n \frac{\tilde{V}_{fn}^* \tilde{V}_{ni}}{\hbar^2 (\omega_{ni} + \omega - i\gamma_{ni})}. \quad (6.42)$$

Для переходов в дискретном спектре справедливо неравенство: $|\omega_{fi}| \gg \gamma_{fi}$, поэтому в рассматриваемом случае можно положить $\omega_{fi} = 0$, т. е. вынужденное рассеяние происходит без возбуждения квантовой системы, тогда

$$G_{fi}^{(h)}(0) = G_{ii}^{(h)}(0) = \frac{1}{\pi\gamma_{ii}}. \quad (6.43)$$

Суммирование по промежуточным состояниям в амплитудах двухфотонных процессов включает суммирование по вырожденным состояниям и интегрирование по непрерывному спектру энергий. Переходы из начального и конечного состояний квантовой системы в промежуточные называют *виртуальными переходами*. В отличие от реальных переходов виртуальные не имеют место в действительности, а являются скорее способом интерпретации полученных формул.

Подставим в формулы для вероятностей вынужденных двухфотонных процессов явные выражения для матричных элементов \tilde{V}_{jk}



(6.18), просуммируем по состояниям конечного уровня энергии и усредним по состояниям начального уровня энергии, в результате для двухфотонного поглощения имеем:

$$w_{fi}^{(2\text{abs})} = \frac{(2\pi)^3 u^2}{\hbar^2 g_i} G_{fi}(2\omega) \left| \frac{1}{\hbar} \sum_n \frac{(\mathbf{e} \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e} \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} \right|^2, \quad (6.44)$$

где \mathbf{e} — единичный вектор поляризации поглощаемого излучения, пространственная плотность энергии монохроматического излучения

$$u = \frac{E_0^2}{8\pi}.$$

В (6.44) подразумевается суммирование по вырожденным состояниям всех уровней энергии. Из полученного выражения следует, что вероятность двухфотонного поглощения в монохроматическом излучении пропорциональна квадрату плотности энергии электромагнитного поля u . Этот результат справедлив в рамках применимости теории возмущений, использовавшейся всюду в данном параграфе.

Выражение для вынужденного двухфотонного излучения следует из (6.44) после замены $\omega \rightarrow -\omega$, как и при выводе формул (6.41) и (6.42):

$$w_{fi}^{(2\text{em})} = \frac{(2\pi)^3 u^2}{\hbar^2 g_i} G_{fi}(-2\omega) \left| \frac{1}{\hbar} \sum_n \frac{(\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega - i\gamma_{ni}} \right|^2. \quad (6.45)$$

Здесь произведено комплексное сопряжение единичного вектора поляризации $\mathbf{e} \rightarrow \mathbf{e}^*$, что существенно для эллиптически-поляризованного излучения, когда вектор \mathbf{e} является комплексным.

Рассмотрим переход между дискретными уровнями энергии квантовой системы в результате поглощения n -фотонов. Для вывода формулы, описывающей вероятность этого процесса, можно воспользоваться теорией возмущений, основанной на итерационном решении уравнения (6.15). С этой целью в правую часть равенства (6.15) нужно подставить коэффициент $c_i(t)$, вычисленный в $(n - 1)$ порядке малости по электромагнитному воздействию. Тогда левая часть ра-

венства будет пропорциональна амплитуде n -фотонного процесса. Таким образом, чтобы найти коэффициент $c_i(t)$ в заданном порядке теории возмущений n , нужно последовательно вычислить функции $c_i^{(j)}(t)$ для $j = 1, 2, \dots, n - 1$.

Формульное описание можно сделать более наглядным и простым, если воспользоваться графическим представлением. В этом представлении амплитуде квантового перехода, вычисленной в некотором порядке теории возмущений, ставится в соответствие набор графических образов — *диаграмм Фейнмана*. Эти диаграммы составляются по определенным правилам, так что, зная порядок процесса, можно сразу выписать нужную диаграмму.

В простейшем случае однофотонного поглощения соответствующая диаграмма Фейнмана показана на рис. 6.5. Здесь прямые линии отвечают волновым функциям начального и конечного состояния квантовой системы. Пунктиру соответствует комплексная амплитуда напряженности электрического поля поглощаемого фотона. Точка пересечения (вершина) отвечает оператору дипольного момента квантовой системы. Вершина соотносится пространственной точке \mathbf{r} , по которой при вычислении амплитуды производится интегрирование. Однофотонное излучение представляет та же диаграмма, но со стрелкой фотонной линии, направленной от вершины.

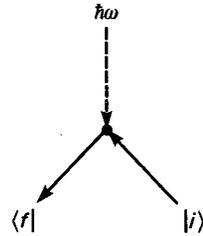


Рис. 6.5. Диаграмма Фейнмана, описывающая однофотонное поглощение в первом порядке теории возмущений

Диаграмма для двухфотонного поглощения изображена на рис. 6.6. В ней, помимо элементов рис. 6.5, есть линия, соединяющая вершины. Это графический образ пропагатора (или функции Грина) квантовой системы. Пропагатор соединяет две пространственные точки \mathbf{r} и \mathbf{r}' , поэтому он также называется функцией распространения. Пропагатор можно представить в виде набора виртуальных частиц, отвечающих сумме по промежуточным состояниям в опреде-



лении (6.35). Пропагаторы бывают двух типов: квантовой системы, как на рис. 6.6, и фотонные, которые здесь не рассматриваются. При вычислении двухфотонной амплитуды предполагается интегрирования по радиусом-векторам \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

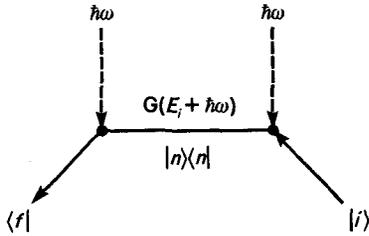


Рис. 6.6. Диаграмма Фейнмана, описывающая двухфотонное поглощение во втором порядке теории возмущений

При составлении диаграмм Фейнмана нужно иметь в виду следующее правило: алгебраическая сумма энергий в каждой вершине равна нулю. Энергия частицы, линия которой входит в вершину, берется со знаком плюс, в противном случае — со знаком минус. Указанное правило, будучи примененным к крайней левой вершине, отвечает закону сохранения энергии в рассматриваемом процессе.

Вышеописанные правила диаграммной техники относятся к нерелятивистскому случаю, когда оператор электромагнитного взаимодействия имеет вид (6.7) или (6.6). Релятивистский формализм подразумевает квантование электромагнитного поля и излагается в курсах квантовой электродинамики.

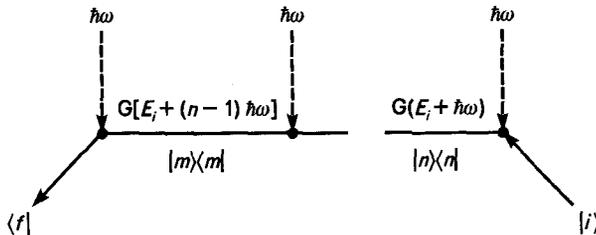


Рис. 6.7. Диаграмма Фейнмана, описывающая n -фотонное поглощение

С учетом сказанного нетрудно выписать диаграмму, описывающую n -фотонное поглощение. Она изображена на рис. 6.7. По радиусам-векторам \mathbf{r}_j ($j = 1, \dots, n$) n вершин диаграммы предполагается

интегрирование. Соответствующее аналитическое выражение для амплитуды имеет вид:

$$A_{fi}^{(\text{nabs})} = \frac{1}{\hbar} \langle f | \hat{V} G(E_i + (n-1)\hbar\omega) \hat{V} \dots \hat{V} G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle. \quad (6.46)$$

Если известна функция Грина квантовой системы, то полученная формула может быть использована для вычисления амплитуды непосредственно без дальнейших преобразований. В противном случае правую часть (6.46) нужно конкретизировать. Подставляя определение функции Грина (6.35) в (6.46), находим:

$$A_{fi}^{(\text{nabs})} = \frac{1}{\hbar^n} \sum_{s, p, \dots, m} \frac{\tilde{V}_{fs} \tilde{V}_{sp} \dots \tilde{V}_{mi}}{(\omega_{si} - (n-1)\omega) \dots (\omega_{mi} - \omega)}. \quad (6.47)$$

Суммирование здесь производится по всем состояниям квантовой системы, включая начальное и конечное состояния. В числителях дробей под знаком суммы содержится n сомножителей, отвечающих поглощению n фотонов, а в знаменателях — $(n-1)$ сомножителей по числу функций Грина в диаграмме. С учетом явного выражения для матричного элемента взаимодействия (6.18) в предположении, что вектор E_0 параллелен оси z , из (6.47) получаем

$$A_{fi}^{(\text{nabs})} = \left(\frac{E_0 e^{-i\varphi}}{2\hbar} \right)^n \sum_{s, p, \dots, m} \frac{(d_z)_{fs} (d_z)_{sp} \dots (d_z)_{mi}}{[\omega_{si} - (n-1)\omega] \dots [\omega_{mi} - \omega]}. \quad (6.48)$$

Вероятность в единицу времени n -фотонного поглощения равна:

$$w_{fi}^{(\text{nabs})} = 2\pi G_{fi}(n\omega) |A_{fi}^{(\text{nabs})}|^2. \quad (6.49)$$

Здесь при записи аргумента функции формы линии использовалось следующее правило: аргумент равен алгебраической сумме n частот ω , каждая из которых берется со знаком плюс, если соответствующая фотонная линия направлена к вершине диаграммы, и со знаком минус в противоположном случае. Для вырожденных уровней энергии $E_{i,f}$ правую часть равенства (6.49) нужно усреднить по начальным состояниям и просуммировать по конечным.

В случае сферически-симметричной квантовой системы на основании полученных выражений можно сделать один общий вывод:



если начальное и конечное состояния одной четности, то отличны от нуля амплитуды (и вероятности) процессов с четным числом фотонов, если разной, то число поглощаемых фотонов должно быть нечетным. (Напомним, что четность состояния определяется характером изменения волновой функции системы при инверсии системы координат: если волновая функция не изменяется, состояние является четным, если волновая функция при инверсии меняет знак — нечетным.) Этот вывод является следствием дипольного правила отбора, согласно которому матричный элемент дипольного момента равен нулю для переходов между состояниями с одинаковой четностью. Заметим, что речь идет о переходах в дискретном энергетическом спектре квантовой системы, состояния непрерывного спектра, как правило, вырождены по четности.

Основная трудность при вычислении амплитуды n -фотонного процесса, как об этом уже говорилось при рассмотрении двухфотонных переходов, состоит в необходимости суммирования по промежуточным состояниям энергетического спектра квантовой системы (если неизвестна ее функция Грина). Это суммирование можно произвести, например, в простейшем случае *двухуровневой квантовой системы*, который рассматривается ниже.

Итак, пусть сферически-симметричная квантовая система обладает двумя уровнями энергии E_i и E_f , связанными разрешенным электродипольным переходом. Последняя фраза означает, что матричный элемент электрического дипольного момента

$$d_{fi} = \langle f | \hat{d} | i \rangle,$$

вычисленный между волновыми функциями $\psi_{i,f}$ квантовой системы, не равен нулю. Предположим, что с двухуровневой системой (Two-Level System) взаимодействует монохроматическое излучение частоты ω , вектор напряженности электрического поля в котором линейно поляризован вдоль оси z . Для определенности считаем, что нижний уровень энергии E_i соответствует невырожденному состоянию с равным нулю орбитальным моментом $l_i = 0$ (спиновые эффекты не рассматриваются). Тогда согласно дипольным правилам отбора орбитальное квантовое число состояния верхнего энергетического уровня должно равняться единице $l_f = 1$, а магнитное квантовое число m_f нулю. Равенство $m_f = 0$ является следствием линейной поляризации излучения. Обозначим z -проекцию вектора \hat{d}_{fi} через

d_0 — дипольный момент перехода двухуровневой системы. Ее собственная частота, очевидно, равна:

$$\omega_0 \equiv \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}.$$

Через эти параметры выражается сила осциллятора перехода $i \rightarrow f$, которая согласно (4.51) равна:

$$f_0 = \frac{2m\omega_0 d_0^2}{\hbar e^2}.$$

Производя суммирование в общем выражении для амплитуды n -фотонного поглощения (6.48) по двум возможным в данном случае состояниям, находим:

$$A_{\text{TLS}}^{(\text{nabs})} = C_n \frac{\Omega_0^n}{\omega_0^{n-1}} \exp(-in\varphi), \quad (6.50)$$

где Ω_0 — резонансная частота Раби, физический смысл которой будет выяснен в следующем разделе,

$$\Omega_0 = \frac{d_0 E_0}{2\hbar}; \quad (6.51)$$

C_n — числовой коэффициент,

$$C_n = (-1)^{(n-1)/2} \left(\frac{n}{2}\right)^{(n-1)} \left[\left(\frac{n-1}{2}\right)!\right]^{-2}. \quad (6.52)$$

Напомним, что $n = 2k + 1$ — нечетное число, в противном случае амплитуда (6.50) для рассматриваемого перехода равна нулю.

Таким образом, для вероятности в единицу времени n -фотонного поглощения излучения двухуровневой системой имеем следующее простое выражение

$$w_{\text{TLS}}^{(\text{nabs})} = 2\pi G_0(n\omega) C_n^2 \frac{\Omega_0^{2n}}{\omega_0^{(2n-2)}}, \quad (6.53)$$

где $G_0(\omega)$ — функция формы линии перехода; $n = 2k$ — четное число.

6.6. ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА В РЕЗОНАНСНОМ ПОЛЕ

Как отмечалось выше, необходимое условие применимости теории возмущений (1.9) не является, вообще говоря, достаточным. Чтобы выяснить критерий использования этого формализма, рассмотрим поведение двухуровневой системы в электромагнитном поле частоты ω при выполнении резонансного условия:

$$|\omega - \omega_0| \ll \omega_0, \quad (6.54)$$

где ω_0 — собственная частота квантового перехода:

$$\omega_0 \equiv \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} > 0.$$

Предполагаем, что дипольный момент перехода $\mathbf{d}_{fi} \neq 0$.

Пусть электромагнитное поле включается в нулевой момент времени. Тогда из общей формулы (6.15) следуют два уравнения на коэффициенты разложения $c_{i,f}(t)$ волновой функции двухуровневой системы по энергетическим состояниям:

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\tilde{V}_{fi} e^{i(\omega_0 - \omega)t'} + \tilde{V}_{fi}^* e^{i(\omega_0 + \omega)t'} \right] c_i(t') dt'; \quad (6.55)$$

$$c_i(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\tilde{V}_{if} e^{i(-\omega_0 - \omega)t'} + \tilde{V}_{if}^* e^{i(-\omega_0 + \omega)t'} \right] c_f(t') dt'. \quad (6.56)$$

При выводе (6.55) и (6.56) использована формула (6.17) и учтено, что $\tilde{V}_{ii} = \tilde{V}_{ff} = 0$ (так как $\mathbf{d}_{ii} = \mathbf{d}_{ff} = 0$ для сферически симметричной системы). Второе слагаемое в квадратных скобках (6.55) и первое слагаемое в квадратных скобках (6.56) являются быстроосциллирующими функциями, поэтому их вкладом в интегралы по времени можно пренебречь. Пренебрежение указанными членами соответствует *приближению вращающейся волны*, которое часто используется при расчете резонансных взаимодействий. Подставляя после этого (6.55) в правую часть (6.56), приходим к следующему интегральному уравнению:

$$\dot{c}_i(t) = -\Omega_0^2 e^{-i\Delta t} \int_0^t e^{i\Delta t'} c_i(t') dt', \quad (6.57)$$

где $\Delta = \omega_0 - \omega$ — точка, означающая дифференцирование по времени; Ω_0 — резонансная частота Раби согласно определению (6.51),

$$\Omega_0 = \frac{\vec{V}_{fi}}{\hbar}.$$

Для решения (6.57) удобно ввести вспомогательную функцию

$$y(t) = \exp(i\Delta t) c_i(t),$$

тогда дифференцируя (6.57), получаем

$$\ddot{y} - i\Delta\dot{y} + \Omega_0^2 y = 0. \quad (6.58)$$

Отсюда находим общее решение для коэффициента $c_i(t)$:

$$c_i(t) = \exp\left(-i\frac{\Delta}{2}t\right) [A \exp(-i\Omega t) + B \exp(i\Omega t)], \quad (6.59)$$

где Ω — (нерезонансная) частота Раби,

$$\Omega = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \Omega_0^2}; \quad (6.60)$$

A и B — постоянные коэффициенты, определяемые из начальных условий. Пусть двухуровневая система в начальный момент времени находилась на нижнем энергетическом уровне, тогда

$$c_i(0) = 1 \quad \text{и} \quad \dot{c}_i(0) = 0.$$

Последнее равенство следует из формулы (6.57). Принимая во внимание эти начальные условия, находим константы A и B . В результате вместо (6.59) имеем:

$$c_i(t) = \exp\left(-i\frac{\Delta}{2}t\right) \left\{ \cos(\Omega t) - i\frac{\Delta}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right\}. \quad (6.61)$$

Очевидно, что в точном резонансе ($\Delta = 0$) равенство (6.61) дает

$$c_i(t) = \cos(\Omega t).$$

Подставляя (6.61) в (6.55) (без нерезонансного слагаемого в квадратных скобках), находим для второго коэффициента $c_f(t)$ следующее выражение:

$$c_f(t) = -i\frac{\Omega_0}{\Omega} \exp\left(-i\frac{\Delta}{2}t\right) \sin(\Omega t). \quad (6.62)$$

Введем по определению населенность j -го уровня ($j = i, f$):

$$N_j(t) = |c_j(t)|^2. \quad (6.63)$$

Подставляя (6.61) в (6.63), находим для населенности нижнего энергетического уровня следующее выражение:

$$N_i(t) = \cos^2(\Omega t) + \frac{\Delta^2}{4\Omega^2} \sin^2(\Omega t). \quad (6.64)$$

Аналогично для населенности верхнего уровня имеем:

$$N_f(t) = \left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right)^2 \sin^2(\Omega t). \quad (6.65)$$

Легко видеть, что в любой момент времени выполняется равенство $N_i(t) + N_f(t) = 1$, отражающее нормировку полной волновой функции двухуровневой системы.

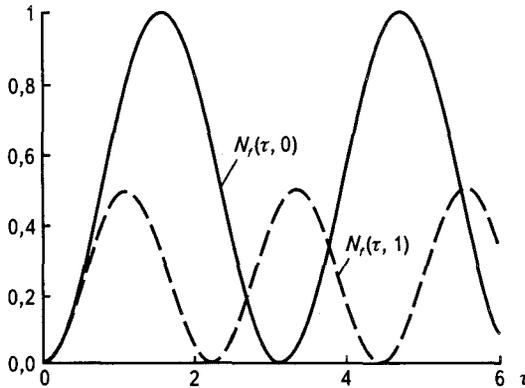


Рис. 6.8. Осцилляции населенности верхнего энергетического уровня для различных значений параметра $\delta = \Delta/2\Omega_0$:

сплошная кривая — $\delta = 0$; штриховая кривая — $\delta = 1$

Из полученных выражений вытекает физический смысл частоты Раби, которая согласно (6.64) и (6.65) определяет скорость осцилляций населенности между уровнями двухуровневой системы. Эти осцилляции в случае верхнего энергетического уровня для различных значений параметра относительной отстройки частоты поля от резонанса $\delta = \Delta/2\Omega_0$ представлены на рис. 6.8.

На рис. 6.8 по оси абсцисс отложено безразмерное время в единицах обратной резонансной частоты Раби: $\tau = \Omega_0 t$. Видно, что при нулевой отстройке от резонанса $\Delta = 0$ населенность верхнего уровня достигает максимально возможного значения, равного единице, на временах

$$\tau = (2k + 1) \frac{\pi}{2}$$

(k — натуральное число). При $\tau = \pi k$, напротив, данная населенность обращается в ноль. С ростом отстройки максимальное значение населенности верхнего энергетического уровня уменьшается, а частота осцилляций увеличивается.

Пользуясь равенством (6.65), можно определить вероятность в единицу времени возбуждения рассматриваемой квантовой системы:

$$w_{fi}^{\text{TLS}}(t) = \frac{N_f(t)}{t} = \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2 t} \sin^2(\Omega t). \quad (6.66)$$

Результат теории возмущений получается из (6.65) в пределе $|\Delta| \gg \Omega_0$, когда $\Omega \approx \Delta$. В этом случае из (6.66), устремляя время к бесконечности, находим:

$$w_{fi}^{\text{TLS}} = \Omega_0^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2[(\Delta/2)t]}{(\Delta/2)^2 t} = 2\pi\delta(\Delta)\Omega_0^2. \quad (6.67)$$

При выводе (6.66) использовалось равенство:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2 t} = \pi\delta(\alpha). \quad (6.68)$$

Принимая во внимание определение резонансной частоты Раби (6.51), легко видеть, что правая часть (6.67) совпадает с вероятностью однофотонного перехода, вычисленной в первом порядке теории возмущений (6.22).

Если учесть ширину линии двухуровневой системы γ_0 , то критерий применимости теории возмущений, следующий из проведенного рассмотрения, можно представить в виде:

$$\Omega_0 \ll \max\{|\Delta|, \gamma_0\}, \quad (6.69)$$

отсюда вытекает условие на величину напряженности электрического поля:

$$E_0 \ll \max \left\{ \frac{\hbar |\Delta|}{d_0}, \frac{\hbar \gamma_0}{d_0} \right\}. \quad (6.70)$$

Этим условием надо дополнить неравенство (1.9), чтобы гарантировать применимость теории возмущений в резонансном случае (6.54).

6.7. ФОТОВОЗБУЖДЕНИЕ ВЕЩЕСТВА УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Развитие техники генерации ультракоротких импульсов электромагнитного излучения делает актуальным рассмотрение специфических особенностей его взаимодействия с веществом и развитие адекватных способов описания электромагнитных процессов в ультракоротких полях. Использование ультракоротких лазерных импульсов открывает новые возможности в сверхбыстром контроле светоиндуцированных явлений, аттосекундной метрологии, спектроскопии, микроскопии и плазмонике.

В рамках применимости теории возмущений в случае воздействия на вещество относительно длинных импульсов излучения отклик на электромагнитное воздействие обычно описывается с помощью вероятности фотопроцесса в единицу времени w .

Вероятность в единицу времени может быть определена через сечение σ фотопроцесса по формуле

$$w = \int \sigma(\omega') \frac{I(\omega')}{\hbar \omega'} d\omega', \quad (6.71)$$

где $I(\omega')$ — спектральная интенсивность излучения, которая для монохроматического поля частоты ω равна

$$I(\omega') = I_0 \delta(\omega - \omega'),$$

где I_0 — интегральная интенсивность.

Отметим, что сечение $\sigma(\omega')$, рассмотренное в разд. 4.6, отвечает воздействию *монохроматического* поля на заданной частоте ω' ,

интегрирование по частотам в правой части равенства (6.71) учитывает некогерентность излучения. Если длительность импульса существенно превосходит период колебаний на несущей частоте $T = 2\pi/\omega$, спектральная интенсивность излучения определяется через автокоррелятор напряженности электрического поля по формуле [6]

$$I(\omega') = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \langle E_i(t) E_i(t+\tau) \rangle_i \exp(i\omega'\tau) d\tau, \quad (6.72)$$

где символ $\langle \dots \rangle_i$ означает усреднение по времени.

При переходе к ультракоротким импульсам, состоящим из малого числа оптических циклов или даже части цикла, понятие вероятности фотопроцесса в единицу времени становится неадекватным, и больший физический смысл приобретает описание электромагнитного взаимодействия с помощью полной вероятности за все время действия импульса. Итак, для ультракоротких импульсов формулы (6.71) и (6.72) не работают.

Для описания процессов в ультракоротких полях в рамках теории возмущений целесообразно обобщить равенство (6.71) на вычисление *полной* вероятности фотопроцесса W за *все время действия* ультракороткого импульса, причем таким образом, чтобы сохранить описание свойств возбуждаемой системы с помощью сечения $\sigma(\omega')$. Этому вопросу и посвящен данный раздел [7].

Итак, рассмотрим фотовозбуждение квантовой системы из основного состояния $|0\rangle$ в некоторое возбужденное состояние $|n\rangle$ под действием дипольного возмущения

$$\hat{V}(t) = -\hat{d}_i E_i(t), \quad (6.73)$$

где \hat{d} — оператор электрического дипольного момента системы; $E(t)$ — напряженность электрического поля, которая подразумевается классической величиной, не зависящей от пространственной координаты (дипольное приближение). Амплитуда этого процесса в первом порядке теории возмущений за все время действия поля равна:

$$c_{n0} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle n | \hat{d}_i(t) | 0 \rangle E_i(t) dt, \quad (6.74)$$



где $\hat{d}_i(t)$ — оператор дипольного момента в представлении взаимодействия:

$$\hat{d}_i(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \hat{d}_i \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right),$$

\hat{H}_0 — невозмущенный гамильтониан системы.

Для вероятности фотовозбуждения системы за все время действия возмущения на переходе $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ имеем:

$$W_{n0} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t') | n \rangle \langle n | \hat{d}_k(t) | 0 \rangle E_i(t') E_k(t) dt dt'. \quad (6.75)$$

Полная вероятность фотовозбуждения, учитывающая переходы во все состояния системы, равна:

$$W_{\text{tot}} = \sum_n W_{n0} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t') \hat{d}_k(t) | 0 \rangle E_i(t') E_k(t) dt dt'. \quad (6.76)$$

При выводе (6.76) из (6.75) была использована полнота набора функций $|n\rangle$ и учтено, что

$$\langle 0 | \hat{d}_i(t) | 0 \rangle = 0$$

для сферически симметричной системы, так что в сумму (6.76) для соблюдения условия полноты можно включить слагаемое, отвечающее неизменному состоянию системы W_{00} .

Учтем теперь, что коррелятор дипольных моментов стационарной в невозмущенном состоянии системы зависит только от разности моментов времени $\tau = t' - t$:

$$K_{ik}(\tau) = \langle 0 | \hat{d}_i(t') \hat{d}_k(t) | 0 \rangle,$$

в чем легко убедиться непосредственно. Тогда формулу (6.76) можно переписать в виде:

$$W_{\text{tot}} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) E_i(t+\tau) E_i(t) dt d\tau. \quad (6.77)$$

Здесь учтено, что для центрально-симметричной системы

$$K_{ik}(\tau) = \delta_{ik} K(\tau),$$

где

$$K(\tau) = \frac{K_{ii}(\tau)}{3}.$$

Переходя в равенстве (6.77) к Фурье-образам подынтегральных функций по формуле

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega') \exp(i\omega' t) \frac{d\omega'}{2\pi},$$

получаем

$$W_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega') I(\omega', t) d\omega' dt, \quad (6.78)$$

где введена функция

$$I(\omega', t) = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} E_i(t) E_i(t + \tau) \exp(i\omega' \tau) d\tau. \quad (6.79)$$

Функция (6.79) может быть названа спектральной плотностью мгновенной интенсивности излучения. Фурье-образ коррелятора дипольных моментов равен по определению

$$K(\omega) = \frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \hat{d}_i(t) \hat{d}_i(t + \tau) | 0 \rangle \exp(i\omega \tau) d\tau. \quad (6.80)$$

Исходя из формулы (6.79), несложно доказать равенство:

$$\int_{-\infty}^{\infty} I(\omega', t) dt = \frac{c}{(2\pi)^2} |E(\omega')|^2. \quad (6.81)$$

Подставляя выражение (6.81) в правую часть равенства (6.78), получаем

$$W_{\text{tot}} = \frac{1}{2\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega') |E(\omega')|^2 d\omega'. \quad (6.82)$$

Рассмотрим случай монохроматического поля $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$, когда средняя по периоду $T = 2\pi/\omega$ интенсивность равна:

$$\langle I(\omega', t) \rangle_T = I_0 \delta(\omega - \omega') \langle 1 + \exp(-2i\omega t) \rangle_T = I_0 \delta(\omega - \omega'), \quad (6.83)$$

где

$$I_0 = \frac{cE_0^2}{8\pi}.$$

Учитывая равенство (6.83) и интегрируя в (6.78) по конечному временному интервалу Δt , находим:

$$W_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c} K(\omega) I_0 \Delta t, \quad (6.84)$$

откуда можно перейти к вероятности фотовозбуждения в единицу времени:

$$w_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 c} K(\omega) I_0. \quad (6.85)$$

С другой стороны, по определению сечения фотопоглощения в монохроматическом поле частоты ω имеем:

$$w_{\text{tot}} = \sigma(\omega) \frac{I_0}{\hbar\omega}. \quad (6.86)$$

Величина $I_0/\hbar\omega$ — представляет собой плотность потока фотонов монохроматического излучения. Сравнивая формулы (6.85) и (6.86) находим выражение для Фурье-образа коррелятора дипольных моментов через сечение фотопоглощения в дипольном приближении:

$$K(\omega) = \frac{\hbar c}{2\pi\omega} \sigma(\omega). \quad (6.87)$$

Отсюда следует важная формула для сечения фотопоглощения

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi\omega}{\hbar c} K(\omega), \quad (6.88)$$

Подставляя (6.87) в (6.82) получаем выражение для полной вероятности рассматриваемого процесса за все время действия импульса излучения. Поскольку речь идет о фотопоглощении при интегриро-

вании в (6.82), нужно ограничиться только положительными частотами, так что окончательно находим:

$$W_{\text{tot}} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \frac{|E(\omega')|^2}{\hbar\omega'} d\omega'. \quad (6.89)$$

Для сечения фотопоглощения можно написать равенство:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega') &= \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \left\{ \sum_{n>0} f_{n0} G_{n0}(\omega') + g_{c0}(\omega') \right\} = \\ &= \sum_n \sigma_{n0}(\omega') + \sigma_{c0}(\omega'), \end{aligned} \quad (6.90)$$

в котором выделен вклад в полное сечение дискретного спектра (сумма по n) и непрерывного спектра (второе слагаемое в фигурных скобках). Здесь f_{n0} — силы осцилляторов; $G_{n0}(\omega')$ — спектральная форма линии на переходе $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$; $g_{c0}(\omega')$ — спектральная функция дипольного возбуждения в непрерывный энергетический спектр (см. гл. 7). В правую часть (6.90) входят: $\sigma_{n0}(\omega')$ — сечение фотовозбуждения дискретного уровня энергии, а $\sigma_{c0}(\omega')$ — сечение возбуждения состояния в непрерывном спектре. С учетом (6.90) из (6.89) можно получить следующее выражение для полной вероятности фотовозбуждения n -го состояния дискретного спектра:

$$W_{n0} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \sigma_{n0}(\omega') \frac{|E(\omega')|^2}{\hbar\omega'} d\omega' \quad (6.91)$$

или

$$W_{n0} = \frac{e^2}{2m} f_{n0} \int_0^{\infty} G_{n0}(\omega') \frac{|E(\omega')|^2}{\hbar\omega'} d\omega'. \quad (6.92)$$

Полученные выражения (6.91) и (6.92) справедливы в рамках применимости теории возмущений, когда $W_{n0} < 1$.

В случае, когда спектральная ширина импульса

$$\Delta\omega \propto \frac{1}{\Delta t}$$

много больше спектральной ширины связанно-связанного перехода $\Delta\omega \gg \Delta\omega_{n0}$, функцию формы линии можно заменить на дельта-функ-

цию $G_{n_0}(\omega') \rightarrow \delta(\omega_{n_0} - \omega')$. После этой замены формула (6.91) с учетом выражения для силы осциллятора:

$$f_{n_0} = \frac{2m\omega_{n_0} |d_{n_0}|^2}{3\hbar e^2}$$

приводит к простому выражению для вероятности фотоперехода

$$W_{n_0} = |\Omega(\omega_{n_0})|^2, \quad (6.93)$$

где $\Omega(\omega_{n_0})$ — Фурье-образ мгновенной частоты Раби, вычисленный на собственной частоте возбуждаемого перехода

$$\Omega(\omega_{n_0}) = \frac{d_{n_0} E(\omega_{n_0})}{\hbar}.$$

Равенство (6.93), естественно, можно получить напрямую в первом порядке теории возмущений по напряженности электрического поля с помощью формул (6.74) и (6.75).

Для вероятности возбуждения произвольного состояния в непрерывном спектре за все время действия импульса поля из (6.89) и (6.90) находим:

$$W_{c_0} = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_{I_p/\hbar}^{\infty} \sigma_{c_0}(\omega') \frac{|E(\omega')|^2}{\hbar\omega'} d\omega', \quad (6.94)$$

где I_p — потенциал ионизации рассматриваемой системы. Для дифференциальной вероятности фотовозбуждения в состояние непрерывного спектра с энергией ϵ из (6.94) можно получить

$$\frac{dW}{d\omega_{\epsilon_0}} = \frac{c}{(2\pi)^2} \sigma_{c_0}(\omega_{\epsilon_0}) \frac{|E(\omega_{\epsilon_0})|^2}{\hbar\omega_{\epsilon_0}}, \quad (6.95)$$

где ω_{ϵ_0} — частота перехода в заданное состояние непрерывного спектра:

$$\omega_{\epsilon_0} = \frac{I_p + \epsilon}{\hbar}.$$

Формула (6.95) получается из (6.94) с помощью подстановки дельта-функции $\delta(\omega_{\epsilon_0} - \omega')$ в подынтегральное выражение правой части

равенства (6.94). Эта подстановка выделяет переход системы из основного состояния в состояние непрерывного спектра с заданной энергией $|0\rangle \rightarrow |\varepsilon\rangle$.

Для произвольного фотоиндуцированного процесса в квазимонохроматическом поле можно записать следующее выражение для вероятности в единицу времени через сечение процесса:

$$w_{\text{tot}}(t) = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \frac{I(\omega', t)}{\hbar\omega'} d\omega'. \quad (6.96)$$

Здесь сечение $\sigma(\omega')$ может описывать не только фотопоглощение, но и другие фотопроцессы, такие как рассеяние, вынужденное тормозное излучение и вынужденная фоторекомбинация. Интегрируя равенство (6.96) по времени, получаем для вероятности за все время действия импульса:

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} w(t) dt = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I(\omega', t)}{\hbar\omega'} dt d\omega'. \quad (6.97)$$

Отсюда с учетом (6.81) приходим к формуле (6.89).

В случае квазимонохроматического поля можно записать аналогично (6.91)—(6.95) выражение для энергии электромагнитного импульса, поглощаемой квантовой системой за все время взаимодействия с излучением:

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} Q(t) dt = \int_0^{\infty} \sigma(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega', t) dt d\omega'. \quad (6.98)$$

Отсюда с учетом формулы (6.81) находим

$$\Delta E = \frac{c}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \sigma(\omega') |E(\omega')|^2 d\omega'. \quad (6.99)$$

Таким образом, с помощью формул (6.89), (6.95) можно описать не только фотопоглощение в ультракоротком импульсе, но и другие фотопроцессы, такие как рассеяние излучения, а также вынужденный тормозной эффект. Для этого необходимо в правую часть равенства (6.89) подставить соответствующее сечение.

Рассмотрим фотовозбуждение системы под действием лазерного импульса, в котором напряженность электрического поля изменяется по закону (импульс с гауссовой огибающей):

$$E(t) = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\Delta t^2}\right) \cos(\omega t + \varphi), \quad (6.100)$$

где E_0 — амплитуда; ω — несущая частота; φ — СЕ-фаза; Δt — параметр, пропорциональный длительности импульса Δt_p .

Фурье-образ поля (6.100) имеет вид:

$$\begin{aligned} E(\omega') &= \quad (6.101) \\ &= E_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Delta t \left\{ \exp\left[-i\varphi - \frac{(\omega - \omega')^2 \Delta t^2}{4}\right] + \exp\left[i\varphi - \frac{(\omega + \omega')^2 \Delta t^2}{4}\right] \right\}. \end{aligned}$$

Длительность импульса Δt_p естественно определить как отношение вероятности за все время действия импульса W к вероятности в единицу времени w для одной и той же формы импульса в пределе больших длительностей ($\Delta t_p \gg \omega^{-1}$):

$$\Delta t_p \leftarrow \frac{W}{w}. \quad (6.102)$$

Тогда для поля (6.100) можно получить связь между параметром Δt и длительностью импульса Δt_p :

$$\Delta t_p = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Delta t \cong 1,253 \Delta t. \quad (6.103)$$

При выводе равенства (6.103) был использован предельный переход (при $\Delta t \rightarrow \infty$) в Фурье-образе импульса (6.101):

$$|E(\omega')|^2 \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} E_0^2 \Delta t \delta(\omega - \omega'),$$

откуда с помощью формулы (6.82) получаем

$$W_{\text{tot}} \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K(\omega)}{4\hbar^2} E_0^2 \Delta t.$$

Сравнивая последнее соотношение с выражением для скорости фотовозбуждения в монохроматическом поле

$$w = \frac{K(\omega)}{4\hbar^2} E_0^2,$$

на основании определения (6.102) приходим к равенству (6.103).

Введем в рассмотрение число циклов в импульсе n_c :

$$n_c = \frac{\Delta t_p}{T} = \frac{\omega \Delta t_p}{2\pi}, \quad (6.104)$$

где $T = 2\pi/\omega$ — период колебания на несущей частоте. С помощью (6.103) получаем для параметра Δt , фигурирующего в формулах (6.100) и (6.101), следующее выражение через число циклов в импульсе:

$$\Delta t = \frac{2\sqrt{2\pi} n_c}{\omega}. \quad (6.105)$$

В дальнейшем будем рассматривать сверхкороткие импульсы, для которых число циклов на несущей частоте $n_c \sim 1$ и меньше.

Квадрат модуля Фурье-образа поля (6.101), который определяет согласно (6.89) вероятность фотовозбуждения за все время действия излучения, выраженный через число циклов, имеет вид:

$$\begin{aligned} |E(\omega')|^2 &= 2\pi^2 \left(\frac{n_c E_0}{\omega} \right)^2 G_E(\omega', \omega, n_c) \times \\ &\times [1 + K_{ph}(\omega', \omega, n_c) \cos(2\varphi)], \end{aligned} \quad (6.106)$$

где [ср. с формулами (1.36), (1.37)]

$$\begin{aligned} G_E(\omega', \omega, n_c) &= \\ &= \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 - \frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \right] + \exp \left[-4\pi n_c^2 \left(1 + \frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \right]; \end{aligned} \quad (6.107)$$

$$K_{ph}(\omega', \omega, n_c) = \operatorname{sech} \left(8\pi n_c^2 \frac{\omega'}{\omega} \right). \quad (6.108)$$

Для вероятности возбуждения дискретного уровня энергии за все время действия импульса имеем из (6.92), (6.106):

$$W_{n_0} = 2\pi^2 \left(\frac{d_{n_0} E_0}{\hbar \omega} n_c \right)^2 \times \quad (6.109)$$

$$\times G_E(\omega_{n_0}, \omega, n_c) [1 + K_{ph}(\omega_{n_0}, \omega, n_c) \cos(2\varphi)]$$

в предположении, что $W_{n_0} < 1$. Как видно из последнего равенства, функция $G_E(\omega_{n_0}, \omega, n_c)$ описывает спектральную форму линии возбуждения связанно-связанного перехода, а $K_{ph}(\omega_{n_0}, \omega, n_c)$ является коэффициентом фазовой модуляции, поскольку определяет степень зависимости вероятности процесса от СЕ-фазы. Графики этих функций приведены на рис. 1.3, 1.4.

Из полученного выражения (6.109) следует, что в условиях справедливости теории возмущений зависимость полной вероятности фотовозбуждения связанно-связанного перехода под действием импульса (6.100) от СЕ-фазы дается функцией $\cos(2\varphi)$. Из численного анализа правой части равенства (6.108) вытекает, что коэффициент фазовой модуляции имеет заметную величину только для субцикловых импульсов: $n_c < 0,5$. Для фиксированного значения параметра n_c коэффициент K_{ph} возрастает с увеличением несущей частоты ω , при этом в соответствии с выражением для спектральной функции возбуждения (6.107) уменьшается величина вероятности процесса. Спектральная функция $G_E(\omega_{n_0}, \omega, n_c)$ заметно отличается от гауссовой зависимости тоже для весьма коротких субцикловых импульсов $n_c < 0,5$, причем при $n_c < 0,2$ данная функция монотонно убывает с ростом отношения ω_{n_0}/ω .

В пределе импульса нулевой длительности ($\Delta t \rightarrow 0$), когда

$$E(\omega') \rightarrow \sqrt{\pi} E_0 \Delta t \cos \varphi,$$

равенство (6.89) преобразуется к виду

$$W_{tot} = \frac{c}{4\pi\hbar} (E_0 \Delta t)^2 \cos^2 \varphi \int_0^\infty \frac{\sigma(\omega')}{\omega'} d\omega'. \quad (6.110)$$

Таким образом, в этом случае полная вероятность фотопоглощения определяется интегралом по частоте от отношения $\sigma(\omega')/\omega'$. При этом зависимость от СЕ (carrier-envelope) фазы дается функ-

цией $\cos^2 \varphi$, что соответствует формуле (6.109), поскольку $K_{ph} \rightarrow 1$ при $\Delta t \rightarrow 0$.

Для полной поглощенной энергии за все время действия импульса в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ из (6.99) вытекает следующее равенство

$$\Delta E = \frac{\pi}{2} N_e r_e (c\Delta t)^2 E_0^2 \cos^2 \varphi, \quad (6.111)$$

где r_e — классический радиус электрона:

$$r_e = \frac{e^2}{mc^2};$$

N_e — число электронов в атоме. При выводе (6.111) было использовано правило сумм для сечения фотопоглощения:

$$\int_0^{\infty} \sigma(\omega') d\omega' = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} N_e. \quad (6.112)$$

Формулы (6.110) и (6.111) справедливы в рамках применимости теории возмущений, когда $W_{tot} < 1$. Как следует из (6.89), предел нулевой длительности импульса реализуется при выполнении неравенства

$$\Delta t < \frac{1}{\Delta\omega_a},$$

где $\Delta\omega_a$ — частотный интервал, дающий основной вклад в интегральное по частоте сечение процесса.

Таким образом, в данном разделе выведены формулы (6.89) и (6.97), выражающие полную вероятность фотопроцесса за все время действия излучения через сечение этого процесса и Фурье-образ напряженности электрического поля в излучении. Полученные равенства описывают фотопроцесс, индуцированный ультракоротким электромагнитным импульсом, когда неприменимы понятия вероятности в единицу времени и интенсивности излучения. Полученные выражения могут быть использованы в расчетах излучательных явлений *в рамках справедливости теории возмущений*. С их помощью было установлено, что фазовый контроль фотопроцесса в дискретном спектре за счет изменения SE-фазы возможен только для субцикловых возбуждающих импульсов.

Литература

1. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: ГИФМЛ, 1963, 641 с.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974, 752 с.
3. *Вавилов С.И.* Микроструктура света (исследования и очерки). М.: АН СССР, 1950, 200 с.
4. *Олейников В.А., Суханова А.В., Набиев И.Р.* Флуоресцентные полупроводниковые нанокристаллы в биологии и медицине. Российские нанотехнологии, 2007. Т. 2, № 1–2, с. 160–173
5. *Norris D.J., Sacra A., Murray C.B. and Bawendi M.G.* Measurement of the size dependent hole spectrum in CdSe quantum dots. Phys. Rev. Lett. 1974, V. 72, 2612
6. *Клышко Д.Н.* Физические основы квантовой электроники. М.: Наука, 1986, 294 с.
7. *Astapenko V.A.* Simple formula for photoprocesses in ultrashort electromagnetic field. Physics Letters A 2010. V. 374, issues 13–14, pp. 1585–1590.

В предыдущей главе рассматривались излучательные переходы атомов и наночастиц между связанными состояниями электронов, отвечающими дискретному энергетическому спектру (связанно-связанные переходы). В ходе таких процессов характер движения электрона остается финитным: он не покидает ближайшей окрестности атома или наночастицы. Данная глава посвящена фотопроцессам, в которых происходит переход электрона из связанного состояния дискретного спектра в свободное состояние непрерывного спектра (связанно-свободный переход). При этом характер движения изменяется с финитного на инфинитный, в результате чего электрон покидает атом, который превращается в положительно заряженный ион. Данное явление для первоначально нейтрального атома называется фотоионизацией, или атомным фотоэффектом. В случае, если атом представлял собой отрицательно заряженный ион, удаление из него электрона в результате поглощения фотона называется фотоотрывом, или фоторазрушением иона.

7.1. ФОТОИОНИЗАЦИЯ И ФОТООТРЫВ В ПЕРТУРБАТИВНОМ РЕЖИМЕ

Рассмотрим сначала связанно-свободный переход квантовой системы с поглощением фотона под действием электромагнитного излучения умеренной интенсивности, когда выполняется условие применимости теории возмущений (1.9), изложенной в разд. 6.2. Такой режим фотопроцесса называется пертурбативным (от англ. *perturbation* — возмущение).

Общие соотношения

Итак, пусть атом возбуждается в результате поглощения фотона внешнего поля. Фотопоглощение характеризуется спектральным сечением, которое связано с вероятностью в единицу времени возбуждения связанного электрона под действием электромагнитного излучения с заданной частотой ω . Для сечения фотопоглощения $\sigma(\omega)$ имеет место ряд общих соотношений, используемых, в частности, при построении приближенных моделей для количественного описания фотоэффекта. Так, величину $\sigma(\omega)$ удобно выразить через *спектральную функцию дипольных возбуждений* $g(\omega)$ в соответствии с формулой [1]:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{137} a_B v_a g(\omega), \quad (7.1)$$

где a_B — радиус Бора; $v_a \cong 2,18 \cdot 10^8$ см/с — скорость электрона на первой боровской орбите в атоме водорода (атомная единица скорости). Здесь и далее число 137 возникло из записи скорости света в атомных единицах:

$$\frac{c}{v_a} \cong 137.$$

Удобство функции $g(\omega)$ заключается в том, что для нее выполняется правило сумм:

$$\int g(\omega) d\omega = N, \quad (7.2)$$

где N — полное число электронов в атоме. Кроме того, спектральная функция $g(\omega)$ удовлетворяет равенству:

$$g(\omega) = \sum_n f_{in} \delta(\omega - \omega_n), \quad (7.3)$$

где f_{in} — сила осциллятора перехода $i \rightarrow n$; ω_n — собственная частота этого перехода. Заметим, что, если речь идет о фотоионизации электронной подоболочки nl с заданным главным n и орбитальным l квантовым числом, то выражения (7.1)—(7.3) следует относить к данной подоболочке и снабдить соответствующими индексами: X_{nl} .

Вышеприведенные формулы (7.1)—(7.3) относятся не только к фотоионизации, но и к фотопоглощению, сопровождаемому электронными переходами в дискретном спектре, т. е. к фотовозбуждению, рас-

смотренному в гл. 6. В случае собственно фотоэффекта суммирование в первом равенстве (7.3) заменяется интегрированием по состояниям непрерывного спектра, причем подынтегральное выражение представляет собой дифференциальную силу осциллятора для перехода в континуум $df/d\varepsilon$, где ε — энергия состояния непрерывного спектра электрона. Дифференциальная сила осциллятора выражается через матричный элемент от оператора дипольного момента перехода $d_{i\varepsilon}$ для переходов в континуум так же, как для переходов в дискретный спектр:

$$\frac{df}{d\varepsilon} = \frac{2\varepsilon |d_{i\varepsilon}|^2}{e^6}, \quad (7.4)$$

где e — элементарный заряд.

Имеет смысл ввести понятие плотности силы осциллятора и для переходов в дискретном спектре, если силу осциллятора такого перехода разделить на интервал энергии от данного уровня до ближайшего энергетического уровня. Можно показать, что для введенной таким образом величины справедливо следующее соотношение [1]:

$$\lim_{n' \rightarrow \infty} \frac{4\pi^2 R_y a_B^2}{137} \frac{f_{nl, n'l'}}{E_{n'+1l'} - E_{n'l'}} = \sigma_{nl, \varepsilon l'}(I_{nl}), \quad (7.5)$$

т. е. нормированная плотность силы осциллятора в режиме бесконечно больших главных квантовых чисел переходит в пороговое значение парциального (соответствующего данному значению орбитального квантового числа l') сечения фотоионизации электронной подболочки nl . Предельный переход (7.5) является демонстрацией гладкого сопряжения оптических характеристик дискретного и непрерывного спектра.

Наиболее общее выражение для сечения фотоионизации электронной подболочки в одноэлектронном приближении (т. е. в пренебрежении межэлектронными корреляциями) имеет вид

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2 N_{nl} v_a}{3e^2 a_B \omega 137 (2l+1)} \left[|d_{nl, \varepsilon(l+1)}|^2 + |d_{nl, \varepsilon(l-1)}|^2 \right], \quad (7.6)$$

где N_{nl} — число эквивалентных электронов, т. е. электронов с одинаковым значением главного и орбитального квантового числа. Здесь введены матричные элементы оператора дипольного момента для переходов в состояния непрерывного спектра с орбитальными кван-

товыми числами, разрешенными правилами отбора. Эти матричные элементы следующим образом могут быть выражены через радиальные волновые функции исходного $R_{nl}(r)$ и конечного $R_{n'l'}$ состояний:

$$d_{nl, n'l'}^r = \frac{e\omega v_a}{a_B} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty R_{nl}(r) r R_{n'l'}(r) r^2 dr, \quad (7.7)$$

где введен математический объект $\begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, называемый $3j$ -символом. Он возникает в результате интегрирования по угловым переменным в определении матричного элемента дипольного момента. $3j$ -символ описывает *правила отбора для дипольного излучения*, согласно которым $l' = l \pm 1$. Естественно, что в случае $l = 0$ имеется одно разрешенное значение квантового числа орбитального момента в конечном состоянии: $l' = 1$. Как правило, в сечение фотоионизации дает основной вклад переход с увеличением квантового числа орбитального момента $l \rightarrow l + 1$. Исключения из этого правила возникают, если по каким-либо специфическим причинам матричный элемент $d_{nl, n, l+1}$ мал или обращается в ноль. Однако в угловом распределении ионизированных электронов, которое мы здесь не рассматриваем, переход $l \rightarrow l - 1$ может играть важную роль.

Водородоподобное приближение

Как это было впервые показано Зоммерфельдом, полное (принтегрированное по углу вылета электрона) сечение фотоионизации для основного $1s$ -состояния водородоподобного иона равно:

$$\sigma_{\text{ph1s}}^{\text{H-like}}(\omega) = \frac{2^9 \pi^2}{3Z^2 137} \left(\frac{I_{1s}}{\hbar\omega} \right)^4 a_B^2 \frac{\exp(-4\zeta \operatorname{arccot} \zeta)}{1 - \exp(-2\pi\zeta)}, \quad (7.8)$$

где ω — частота ионизирующего излучения; Z — заряд ядра; $I_{1s} = Z^2 Ry$ — потенциал ионизации $1s$ -состояния ($Ry = 13,6$ эВ); p — импульс ионизированного электрона:

$$p = \sqrt{2m(\hbar\omega - I_{1s})};$$

ζ — борновский параметр:

$$\zeta = \frac{Zme^2}{p\hbar}.$$

Борновский параметр представляет собой безразмерную величину, характеризующую силу взаимодействия между электроном и заряженной частицей. Этот параметр вводится в теории рассеяния электронов, обычно он записывается через скорость электронов:

$$\zeta = \frac{Ze^2}{\hbar v}.$$

Зависимость зоммерфельдовского сечения фотоэффекта (7.8) от энергии фотона представлена на рис. 7.1 (сплошная кривая).

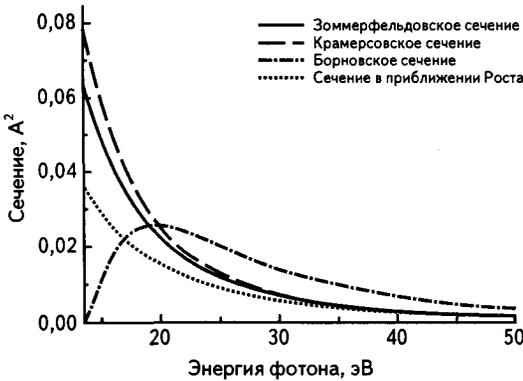


Рис. 7.1. Зоммерфельдовское, крамерсовское и борновское сечения фотоионизации основного состояния атома водорода, а также сечение в приближении Роста

Отметим, что фотоионизация представляет собой процесс первого порядка малости по константе электромагнитного взаимодействия ($e^2/\hbar c \cong 1/137$ — в обычных единицах), что выражается в наличии скорости света (числа 137) в первой степени в знаменателе формулы (7.8).

Вблизи порога фотоионизации, когда $p \rightarrow 0$, $\zeta \rightarrow \infty$, из формулы (7.8) можно получить следующее приближенное выражение для сечения фотоэффекта

$$\begin{aligned} \sigma_{1s}(\omega) &\approx \frac{2^9 \pi^2 a_B^2}{3e^4 Z^2 137} \left(1 - \frac{8(\hbar\omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right) \approx \\ &\approx \frac{0,23 a_B^2}{Z^2} \left(1 - \frac{8(\hbar\omega - I_{1s})}{3 I_{1s}} \right), \end{aligned} \quad (7.9)$$

где e — основание натурального логарифма (не путать с элементарным зарядом). Таким образом, сечение фотоэффекта атома водорода ($Z = 1$) на пороге ($\hbar\omega = Ry$) равно $0,063 \text{ \AA}^2$, или 6,3 мегабарн. Отметим, что сечение фотоионизации атомов часто приводится в мегабарнах: $1 \text{ Мб} = 10^{-18} \text{ см}^2$.

Важной чертой фотоэффекта на водородоподобном атоме, вытекающей из формул (7.8) и (7.9), является тот факт, что максимум величины сечения достигается на пороге, т. е. при минимальной частоте излучения, при которой еще возможна фотоионизация. Для больших частот сечение монотонно уменьшается. Это свойство обусловлено тем обстоятельством, что ионизованный электрон испытывает кулоновское притяжение ядра, увеличивающее сечение процесса.

Из формулы (7.9) следует, что сечение фотоионизации основного состояния водородоподобного иона падает на пороге обратно пропорционально квадрату заряда ядра. Такое поведение сечения имеет простую качественную интерпретацию: с ростом заряда ядра уменьшается радиус основного состояния водородоподобного иона $r_{1s} \propto Z^{-1}$, откуда (в предположении $\sigma_{1s} \propto r_{1s}^2$) и вытекает рассматриваемая пороговая зависимость сечения фотоионизации, которая также может быть представлена в виде:

$$\sigma_{1s}^{\text{thres}} \propto \frac{1}{I_{1s}}. \quad (7.10)$$

Отсюда следует, что пороговое значение сечения фотоэффекта для ns -состояний (с другим главным квантовым числом n) может быть представлено в виде

$$\sigma_{ns}^{\text{thres}} = \frac{I_{1s}}{I_{ns}} \sigma_{1s}^{\text{thres}}.$$

Таким образом, пороговое значение сечения фотоионизации возрастает с ростом главного квантового числа. Любопытно, что данному соотношению с неплохой точностью удовлетворяют экспериментальные сечения даже в случае неводородоподобных атомов. Например, для атома аргона имеем $I_{1s} : I_{2s} : I_{3s} \approx 150 : 10 : 1$, в то время как отношение экспериментальных пороговых сечений для данных оболочек равно: $300 : 30 : 1$.

В высокочастотном режиме $\hbar\omega \gg I_{1s}$ из (7.8) имеем

$$\sigma_{1s}(\omega) \approx \frac{2^8 \pi}{3} \frac{a_B^2}{Z^2 137} \left(\frac{I_{1s}}{\hbar\omega} \right)^{7/2} \left[1 - \pi \sqrt{\frac{I_{1s}}{\hbar\omega}} \right]. \quad (7.11)$$

Формула (7.11) дает известное асимптотическое убывание водородоподобного сечения фотоэффекта с ростом частоты $\omega^{-7/2}$ («закон минус семи вторых»). Имеет смысл подчеркнуть, что сечение фотоионизации (7.8) выходит на свое асимптотическое поведение (7.11) при весьма больших значениях частоты $\omega > 40 I_{1s}/\hbar$, поскольку параметр разложения $(-2\pi\zeta)$ экспоненты в (7.8) только на таких частотах становится заметно меньше единицы.

В случае фотоионизации nl -подоболочек (с $l \neq 0$) сечение фотоэффекта также монотонно убывает с ростом частоты, причем для $\omega \gg I_{nl}/\hbar$ имеем

$$\sigma_{nl}(\omega) \propto \frac{1}{\omega^{(l+7/2)}}, \quad (7.12)$$

т. е. убывание сечения более быстрое.

Как уже отмечалось, из формулы Зоммерфельда (7.8) вытекают характеристические черты сечения фотоионизации водородоподобного иона, такие, как достижение максимума на пороге, монотонное убывание с ростом частоты. Эти характеристические черты при переходе к многоэлектронным атомам, вообще говоря, нарушаются. Тем не менее водородоподобная формула для сечения фотоионизации является исходным пунктом для построения приближенного способа описания процесса по порядку величины. Так, если принять высокочастотную зависимость (7.12), начиная от порога, и воспользоваться правилом сумм

$$\frac{137}{2\pi^2 a_B v_a} \int_{I_{nl}}^{\infty} \sigma_{nl}(\omega) d\omega = N_{nl},$$

то можно получить следующее сечение фотоионизации в водородоподобном приближении:

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2 a_B^2}{137} N_{nl} \left(\frac{5}{2} + l \right) \frac{I_{nl}^{(5/2+l)} \text{Ry}}{(\hbar\omega)^{(7/2+l)}}. \quad (7.13)$$

Расчет сечения по (7.13) для одного $1s$ -электрона дает вблизи порога превышение в 3,2 раза над точным значением, а вдали от порога получается заниженное в 2,7 раза сечение. Следовательно, (7.13) определяет сечение процесса по порядку величины в водородоподобном приближении.

Формула Крамерса для атомного фотоэффекта

Для полуколичественной характеристики излучательных явлений нередко используются простые формулы, полученные Крамерсом в рамках классической физики, которые описывают сечения радиационных процессов при рассеянии электрона в поле точечного заряда. Эти формулы справедливы для немалых значений борновского параметра

$$\zeta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \geq 1,$$

т. е. для больших зарядовых чисел и малых электронных скоростей. В этом случае движение электрона является квазиклассическим, т. е. с хорошей степенью точности может быть описано как движение по классической траектории.

В рамках крамерсовского подхода для сечения фотоионизации атомной подоболочки с квантовыми числами nl можно получить следующее выражение:

$$\sigma_{nl}^{(Kr)}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{3}} N_{nl} \frac{a_B^2}{137Z^2} \sqrt{\frac{Ry}{I_{nl}}} \left(\frac{I_{nl}}{\hbar\omega} \right)^3. \quad (7.14)$$

Отсюда следует формула для сечения фотоионизации атома водорода, если положить $Z = N_{nl} = 1$ и $I_{nl} = Ry$. В результате получается зависимость, представленная на рис. 6.8 штриховой линией. Видно, что, несмотря на свою простоту, формула Крамерса удовлетворительно описывает сечение фотоионизации атома водорода. Наибольшее отличие от точного сечения имеет место на пороге. Формула Крамерса завышает зоммерфельдовское пороговое значение сечения примерно на 30 %. В высокочастотном режиме выражение (7.14) дает иную асимптотику, нежели формула Зоммерфельда (7.8): ω^{-3} вместо $\omega^{-3.5}$. Однако, поскольку выход сечения на высокочастотную асимптотику происходит очень далеко от порога, это отличие слабо сказывается в актуальной области энергий фотонов, где сечение процесса не слишком мало.

Сечение фотоэффекта в борновском приближении

В режиме малых значений борновского параметра

$$\zeta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1$$

влияние атомного остатка на движение ионизированного электрона можно считать малым возмущением. Это имеет место для больших скоростей и малых зарядов ядра. В данном случае при вычислении матричных элементов $d_{n_l, \ell+1}$, фигурирующих в общей формуле для сечения фотоэффекта (7.6), в качестве волновой функции ионизированного электрона можно использовать плоские волны, отвечающие свободному движению. Тогда для сечения фотоионизации атомной подболочки можно получить следующее выражение:

$$\sigma_{n_l}(\omega) = \frac{8\pi^2}{3 \cdot 137} N_{n_l} a_B^2 \frac{Ry}{\hbar\omega} \left(\frac{p(\omega)}{\hbar} \right)^3 \left| g_{n_l} \left(\frac{p(\omega)}{\hbar} \right) \right|^2, \quad (7.15)$$

где $p(\omega)$ — импульс ионизированного электрона:

$$p(\omega) = \sqrt{2m(\hbar\omega - I_{n_l})},$$

I_{n_l} — потенциал ионизации электронной подболочки; $g_{n_l}(k)$ — Фурье-образ радиальной волновой функции начального состояния атома:

$$g_{n_l}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty j_l(kr) R_{n_l}(r) r^2 dr,$$

$R_{n_l}(r)$ — радиальная волновая функция начального состояния атомного электрона, нормированная условием

$$\int_0^\infty |R_{n_l}(r)|^2 r^2 dr = 1;$$

$j_l(kr)$ — сферическая функция Бесселя l -го порядка.

Приведем для справки несколько сферических функций Бесселя:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}; \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x};$$

$$j_2(x) = (3x^{-3} - x^{-1}) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}.$$

Сферические функции Бесселя описывают радиальную зависимость сферической волны с заданным значением орбитального квантового числа l .

В случае фотоионизации основного состояния атома водорода имеем:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_B^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right); \quad g_{10}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{4 a_B^{3/2}}{(1 + k^2 a_B^2)^2};$$

$$N_{n_l} = 1; \quad I_{n_l} = Ry.$$

Подставляя эти равенства в формулу (7.15), находим для сечения фотоионизации атома водорода в борновском приближении следующее выражение:

$$\sigma_{1s}^{(B)}(\omega) = \frac{2^8 \pi}{3 \cdot 137} a_B^2 \frac{Ry}{\hbar\omega} \frac{[p(\omega) a_B / \hbar]^3}{\{1 + [p(\omega) a_B / \hbar]^2\}^2}. \quad (7.16)$$

График функции $\sigma_{1s}^{(B)}(\omega)$ представлен на рис. 7.1 штрихпунктирной линией.

Из рис. 7.1 видна характерная особенность борновского сечения: оно обращается в ноль на пороге в отличие от точного зоммерфельдовского и приближенного крамерсовского сечений, которые на пороге имеют максимум. Это связано с тем фактом, что борновское приближение не учитывает притяжение ядра, увеличивающее величину сечения. В то же время функция (7.16) имеет правильную высокочастотную асимптотику

$$\sigma_{1s}^{(B)}(\hbar\omega \gg Ry) \propto \omega^{-7/2},$$

поскольку в режиме больших энергий фотона ионизированный электрон можно считать свободным, что отвечает условию применимости борновского приближения. Тем не менее отношение борновского сечения к точному для $\hbar\omega = 100$ эВ составляет 2,1, при $\hbar\omega = 1$ кэВ — 1,38 и только для $\hbar\omega = 10$ кэВ это отношение равно 1,12, т. е. сходимость весьма медленная.

Таким образом, для не слишком высоких энергий фотона крамерсовское сечение фотоэффекта на атоме водорода лучше описывает реальную ситуацию, чем борновское сечение.

Модель локальной плазменной частоты

До сих пор сечение фотоионизации рассчитывалось в пренебрежении межэлектронным взаимодействием, т. е. предполагалось, что поглощение фотона происходит в результате взаимодействия электромагнитного поля с отдельными электронами, вклады которых аддитивно складываются, давая полное сечение. Существует весьма простой альтернативный подход к описанию атомного фотоэффекта, основанный на чисто классических соображениях. Это *модель локальной плазменной частоты*, или приближение Брандта—Лундквиста [3], которая рассматривалась в разд. 5.6. В рамках данного подхода атом аппроксимируется неоднородным распределением электронной плотности с концентрацией $n(r)$ (плюс ядро), так что каждой пространственной точке соответствует своя локальная плазменная частота

$$\omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m}},$$

а взаимодействие внешнего электромагнитного поля частоты ω с атомными электронами определяется условием плазменного резонанса

$$\omega = \omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m}}. \quad (7.17)$$

Из этого равенства следует, что поглощение энергии электромагнитного поля атомными электронами происходит на тех расстояниях от ядра, где локальная плазменная частота совпадает с частотой ионизирующего излучения. Данная модель приводит к следующему простому выражению для спектральной функции:

$$g(\omega) = \int d^3r n(r) \delta[\omega - \omega_p(r)]. \quad (7.18)$$

Легко видеть, что спектральная функция (7.18) удовлетворяет правилу сумм (7.2). Для сечения фотоионизации в рассматриваемом приближении согласно (7.1) имеем

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi^2}{137} a_B v_a \int d^3r n(r) \delta[\omega - \omega_p(r)]. \quad (7.19)$$

Наличие дельта-функции в равенстве (7.19) позволяет легко проинтегрировать по пространственным переменным. В результате для сечения фотоионизации в приближении Брандта—Лундквиста находим

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{137v_a} r_\omega^2 \frac{n(r_\omega)}{|n'(r_\omega)|}. \quad (7.20)$$

Здесь r_ω — решение уравнения (7.17), эта величина соответствует расстоянию, на котором имеет место плазменный резонанс, штрих обозначает дифференцирование по радиусу. Таким образом, в рамках рассматриваемой модели сечение фотоэффекта определяется только распределением электронной плотности $n(r)$. Для последней величины удобно использовать статистическую модель атома, в которой

$$n(r) = \frac{Z^2}{a_B^3} f\left(x = \frac{r}{r_{\text{TF}}}\right),$$

где $f(x)$ — универсальная функция приведенного расстояния $x = r/r_{\text{TF}}$; Z — заряд ядра; r_{TF} — радиус Томаса—Ферми:

$$r_{\text{TF}} = \frac{ba_B}{Z^{1/3}},$$

$b \cong 0,8853$. Подставляя вышеуказанное выражение для электронной плотности в формулу (7.20), находим

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}}(\omega) = s \left(\nu = \frac{\hbar\omega}{2Z \text{Ry}} \right) = \frac{9\pi^4\nu}{32 \cdot 137} x_\nu^2 \frac{f(x_\nu)}{|f'(x_\nu)|} a_B^2. \quad (7.21)$$

Здесь введена приведенная частота

$$\nu = \frac{\hbar\omega}{2Z \text{Ry}};$$

x_ν — решение уравнения

$$\nu = \sqrt{4\pi f(x)},$$

являющегося следствием равенства (7.17).

Как видно из (7.21), сечение фотоионизации в приближении Брандта—Лундквиста оказывается универсальной, т. е. не зависящей от заряда ядра, функцией приведенной частоты $s(\nu)$. Формула (7.21) выявляет соответствующий закон подобия (скейлинг) сечения по отношению к переменной ν . Универсальная функция $s(\nu)$ определяется типом статистической модели атома, т. е. зависимостью $f(x)$.

На рис. 7.2 представлены результаты вычисления сечения фотоионизации атома криптона, проведенные в рамках двух альтернативных подходов: квантовом водородоподобном приближении (7.13) — сплошная кривая и с помощью классической локально-плазменной модели (7.21) с электронной плотностью Томаса—Ферми — пунктир.

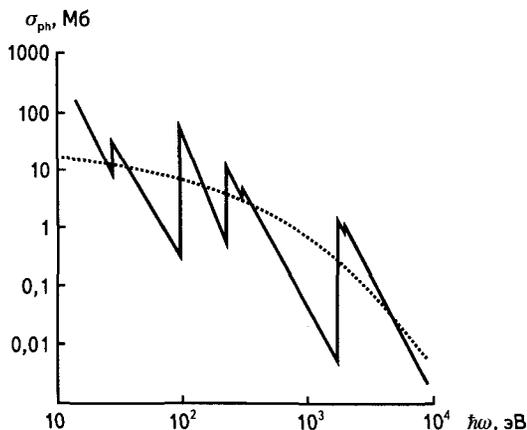


Рис. 7.2. Сечение фотоионизации атома криптона:

сплошная кривая — водородоподобное приближение (7.13); пунктирная — локально-плазменная модель (7.21) с электронной плотностью по Томасу—Ферми

Видно, что первая зависимость представляет собой зубчатую кривую со скачками на частотах, соответствующих потенциалам ионизации электронных подболочек, причем величина скачка уменьшается с ростом потенциала ионизации подболочки в соответствии с формулой (7.10). Сечение фотоионизации атома в локально-плазменной модели (для электронной плотности Томаса—Ферми) представляет собой гладкую монотонно убывающую кривую, сглаженным образом описывающую квантовые скачки водородоподобного приближения.

Основным достоинством рассматриваемого здесь приближения Брандта—Лундквиста является простота, наглядность и универсальность. Оно дает наилучшее описание процесса в спектральных интервалах вблизи порогов ионизации электронных подоболочек, как это видно из рис. 7.2. В оригинальной работе Брандта и Лундквиста [3] отмечалось, что локально-плазменная модель адекватна физике фотопоглощения электромагнитного поля атомом не во всем частотном диапазоне, а на частотах $\omega \approx Z Ry/\hbar$ ($Ry = 13,6$ эВ), когда коллективные взаимодействия доминируют над одночастичными. Для таких частот расстояние до ядра, на котором выполняется условие плазменного резонанса (5.43) (в модели Томаса—Ферми), совпадает с радиусом Томаса—Ферми, т. е. равно расстоянию, где электронная плотность максимальна. Поэтому предположение о доминировании коллективных явлений в фотоэффекте на частотах $\omega \approx Z Ry/\hbar$ представляется оправданным, по крайней мере, на качественном уровне.

Использование для нормированной функции электронной плотности $f(x = r/r_{TF})$ модели экспоненциальной экранировки:

$$f_{\text{exp}}(x) = \frac{128}{9\pi^3} e^{-2x} \quad (7.22)$$

позволяет получить простое аналитическое выражение для сечения фотоэффекта. Действительно, тогда трансцендентное уравнение (7.17) легко решается, и для сечения фотоионизации с помощью (7.21) имеем

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{BL}(\text{exp})} \left(\omega = \frac{2Z Ry}{\hbar} \nu \right) = \frac{9\pi^4 a_B^2 \nu}{64 \cdot 137} \ln^2 \left(\frac{16\sqrt{2}}{3\pi\nu} \right); \quad (7.23)$$

$$\nu \leq \frac{16\sqrt{2}}{3\pi} \cong 2,4.$$

Характерной чертой сечения (7.23) является существование «частоты отсечки», что связано с ограниченностью радиальной электронной плотности вблизи ядра в модели (7.22), так что существует такая частота излучения, при которой условие плазменного резонанса не выполняется. Другой характерной чертой сечения фотоэффекта, вычисленного с функцией (7.22), является наличие ярко выраженного максимума при $\hbar\omega_{\text{max}}^{(\text{exp})} \cong 8,8Z$ эВ.

Сечение атомного фотоэффекта, вычисленное в рамках приближения Брандта—Лундквиста (7.21) с использованием различных статистических моделей атома, представлено на рис. 7.3.

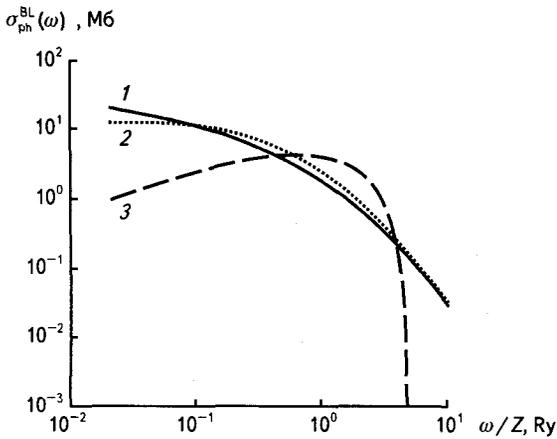


Рис. 7.3. Сечение фотоэффекта в приближение Брандта—Лундквиста в рамках различных статистических моделей атомов:

1 — Томаса—Ферми; 2 — Ленца—Иенсена; 3 — экспоненциальной экранировки

Приближенные квантовые методы расчета сечений фотопоглощения

Наряду с вышерассмотренным классическим методом учета межчастичных корреляций в фотопоглощении существуют приближенные квантовые методы, учитывающие многочастичные эффекты, в которых сечение фотоионизации рассчитывается с использованием несколько более упрощенных подходов по сравнению с последовательным квантово-механическим рассмотрением, таким, как *приближение случайных фаз с обменом* (ПСФО).

Один из таких методов основан на формализме *функционала локальной электронной плотности*. Упрощение расчета достигается за счет введения локального эффективного потенциала для определения одночастичных волновых функций основного состояния системы. С этой целью *нелокальная* обменно-корреляционная энергия рассчитывается в приближении локальной плотности согласно равенствам

$$V_{xc}(r) = -\frac{0,611e^2}{r_s(r)} - \frac{0,1e^2}{3a_B} \ln\left(1 + \frac{11,4a_B}{r_s(r)}\right); \quad (7.24)$$

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3(r) = n^{-1}(r).$$



Запись (7.24) называется локализацией обменно-корреляционного потенциала. В результате решение соответствующих уравнений оказывается не более сложным, чем решение дифференциальных уравнений Хартри. Эффекты межэлектронного взаимодействия учитываются с помощью введения самосогласованного поля, представляющего собой сумму внешнего и индуцированного полей и являющегося решением интегрального уравнения.

Результаты таких расчетов находятся в отличном соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, они свидетельствуют о важной роли многочастичных эффектов в фотоионизации атомов с замкнутыми электронными оболочками. Эти эффекты приводят (за исключением случая неона) к существенному сдвигу максимума сечения фотоионизации в область больших частот по сравнению с приближением независимых электронов, когда положение максимума практически совпадает с пороговой энергией фотона. Например, максимум сечения фотоионизации атома ксенона вблизи $4d$ порога сдвинут примерно на $2,5 R_y$ в сторону высоких частот. При этом отсутствует сильный резонанс, связанный (в рамках одночастичного рассмотрения) с переходом из $4d$ подоболочки в виртуальное f -состояние, расположенное в непрерывном спектре.

Интересно отметить, что метод локальной электронной плотности предсказывает более низкое (на несколько электронвольт) значение порога фотоэффекта по сравнению с его наблюдаемой величиной. В то же время данный метод не описывает высоколежащие состояния дискретного спектра атома. Важно подчеркнуть, что при этом правило сумм для сечения фотопоглощения выполняется, поскольку «нефизический» вклад непрерывного спектра в сечение компенсируется неучтенным вкладом дискретного спектра, прилегающего к порогу фотоионизации. Данное обстоятельство в значительно более выраженном виде присутствует в вышеизложенных вариантах классического описания атомного фотоэффекта. Как это видно из рис. 7.2, модель Томаса—Ферми для атомной электронной плотности дает сечение фотоионизации, сильно затянутое в область низких частот, хотя правило сумм для соответствующих сечений выполняется. В рамках статистических моделей дискретный энергетический спектр атома, естественно, вообще отсутствует, так что «нефизическая» область непрерывного спектра ниже порога фотоионизации — в известной мере моделирует вклад неучтенных связанных состояний.

Гибридный метод Роста

Рассмотрим простую модель атомного фотоэффекта, допускающую аналитическое представление сечения процесса, известную как гибридный метод Роста [4]. С формальной точки зрения данный подход базируется на приближенном операторном равенстве:

$$\exp\left\{-\frac{i(\hat{H}_0 + \Delta_1)t}{\hbar}\right\} \exp\left\{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right\} \approx \exp\left(-\frac{i\Delta_1 t}{\hbar}\right); \quad (7.25)$$

$$\Delta_1 = \frac{e^2 a_B}{r^2},$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан невозмущенного атома. Отсюда вытекает следующее выражение для сечения процесса:

$$\sigma_{\text{ph}}(\omega) \approx \frac{2\pi Z^2 v_a^2}{3 \cdot 137 \omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \psi | \exp\left(-\frac{i\Delta_1 t}{\hbar}\right) | \psi \rangle e^{i\omega t}. \quad (7.26)$$

Представление сечения (7.26) называется «гибридным» приближением, которое является квантово-механическим в силу общего операторного подхода и в то же время имеет классические черты, поскольку используется приближенная коммутация операторных экспонент (7.25). Заметим, что формулу (7.26) можно переписать через электронную плотность, если сделать следующую замену:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 \rightarrow 4\pi r^2 n(r). \quad (7.27)$$

Тогда после интегрирования по времени остающийся интеграл берется в силу наличия дельта-функции, и результат можно представить в виде

$$\sigma_{\text{ph}}(\omega) = \frac{8\pi^3 Z^2}{3 \cdot 137} a_B^5 \left(\frac{2Ry}{\hbar\omega}\right)^{7/2} n\left(r = \sqrt{\frac{a_B v_a}{\omega}}\right). \quad (7.28)$$

Из (7.28), в частности, следует водородоподобная высокочастотная асимптотика сечения фотоионизации, если $n(r \rightarrow 0) \rightarrow \text{const}$. Зависимость (7.28) представлена на рис. 6.8 пунктирной кривой.

Таким образом, так же как и в приближении Брандта—Лундквиста, сечение фотоэффекта в гибридном приближении Роста

оказывается функционалом электронной плотности. Только в этом случае характерное расстояние излучательного процесса r_ω определяется не условием плазменного резонанса (7.17), а разностью атомных гамильтонианов H_1 с орбитальными квантовыми числами, отличающимися (в соответствии с дипольными правилами отбора) на единицу:

$$\hbar\omega = H_1(r) - H_0(r). \quad (7.29)$$

Уравнение (7.29) непосредственно вытекает из (7.25) с учетом закона сохранения энергии. На основании (7.29) можно дать физическую интерпретацию приближения Роста. Из этого уравнения следует, что поглощение фотона происходит при фиксированной электронной координате, так же как в приближении Борна—Оппенгеймера значение координаты ядер молекулы не изменяются в процессе электронного перехода. Отметим, что формула (7.25) является математическим выражением этого факта. Итак, гибридное приближение Роста можно рассматривать как обобщение адиабатического принципа на случай электронных переходов в атомах.

Важно подчеркнуть, что модель Роста не обеспечивает выполнение правила сумм для сечения фотопоглощения (7.2) в отличие от приближения Брандта—Лундквиста. В этом проявляется непоследовательность (гибридность) подхода, использовавшегося при выводе выражения для сечения фотоэффекта в рамках данной модели.

Фоторазрушение отрицательных ионов

Некоторые атомы и молекулы, захватив электрон, могут образовывать отрицательные ионы. В результате такого захвата выделяется энергия, называемая энергией сродства к электрону. В табл. 7.1 приведены значения энергии сродства к электрону ϵ_a для ряда атомов и молекул.

Таблица 7.1

Ион	H	Li	O	F	S	Cl	O ₂	H ₂ O
ϵ_a , эВ	0,75	0,58	1,47	3,45	2,08	3,6	0,45	0,9

Под энергией сродства можно также понимать энергию, необходимую для удаления внешнего электрона отрицательного иона на бесконечность. Эта энергия может быть передана иону в результате поглощения фотона достаточно большой частоты $\omega > \varepsilon_a/\hbar$. Процесс отрыва внешнего электрона отрицательного иона под действием электромагнитного поля называется *фоторазрушением*. В случае фоторазрушения отрицательного иона вырванный электрон находится в поле нейтрального атома, существенно более слабом, чем действующее кулоновское поле иона. Поэтому в первом приближении можно пренебречь влиянием атома на удаленный электрон, полагая его свободным, и в качестве его волновой функции использовать плоскую волну. Иными словами, для описания фоторазрушения отрицательного иона адекватно использование борновского приближения, так что «работает» формула (7.15). Специфика вычисления сечения фоторазрушения опрежится видом функций $g_{nl}(k)$, представляющих собой, как это было определено выше, Фурье-образ волновой функции внешнего электрона отрицательного иона. Простейшая модель, которая может быть использована для радиальной волновой функции $R_{nl}(r)$ отрицательного иона, называется приближением потенциала нулевого радиуса. В этом приближении имеем:

$$R_{10}^{(0)}(r) = \sqrt{2\gamma} \frac{\exp(-\gamma r)}{r},$$

где γ — параметр потенциала размерности обратной длины:

$$\gamma = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_a}}{\hbar}.$$

С использованием этой волновой функции из (7.15) получаем

$$\sigma_{\text{ph}}^{(0)}(\omega) = \frac{4\pi}{3 \cdot 137} a_{\text{B}}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_a}{\text{Ry}}} \left(\frac{\sqrt{2m(\hbar\omega - \varepsilon_a)}}{ma_{\text{B}}\omega} \right)^3. \quad (7.30)$$

Спектральная зависимость сечения (7.30) показана на рис. 7.4.

Видно, что на пороге сечение обращается в ноль, как и должно быть в борновском приближении. Максимум спектральной зависимости достигается при энергии фотона, примерно равной энергии

средства атома водорода (0,75 эВ), а величина сечения в максимуме в 2,6 раз больше максимального сечения фотоионизации нейтрального водорода.

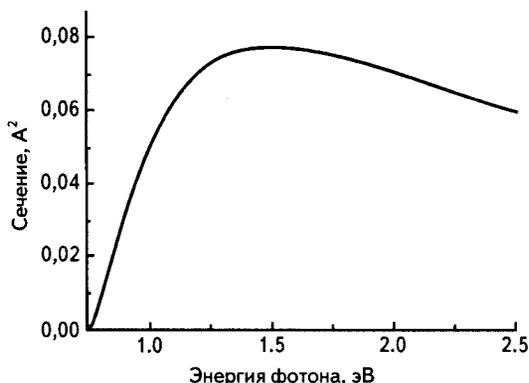


Рис. 7.4. Сечение фоторазрушения отрицательного иона атома водорода, вычисленное в приближении потенциала нулевого радиуса

Из формулы (7.30) вытекает следующая высокочастотная асимптотика сечения фоторазрушения отрицательного иона водорода в приближении потенциала нулевого радиуса:

$$\sigma_{\text{ph}}^{(0)}(\omega) \propto \omega^{-1,5},$$

т. е. сечение с ростом частоты убывает существенно медленнее, чем в случае фотоионизации нейтрального водорода.

Приближение потенциала нулевого радиуса, выгодно отличающееся своей простотой, дает результат, существенно отличающийся от результата более точных моделей. Кроме того, в случае отрицательных ионов атомов с большой поляризуемостью при вычислении сечения фоторазрушения необходимо учитывать переменную поляризацию атома-остова, которая заметно изменяет сечение.

Поляризация остова может также играть существенную роль в процессе ионизации нейтральных многоэлектронных атомов. Этот многочастичный эффект на квантовом уровне учитывается в приближении случайных фаз с обменом, а в рамках классической картины он принимается во внимание в приближении локальной плазменной частоты.

Фазовый контроль фотовозбуждения ультракоротким лазерным импульсом

Применим формулу (6.89), полученную в предыдущей главе, для расчета фотовозбуждения многоэлектронного атома ультракоротким импульсом излучения гауссовой формы (6.100) в модели локальной плазменной частоты. В рамках этой модели выражение для сечения фотопоглощения имеет вид

$$\sigma_{\text{ph}}^{(\text{BL})}(\omega') = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \int n(r) \delta[\omega' - \omega_{pl}(r)] dr, \quad (7.31)$$

где $\omega_{pl}(r)$ — локальная плазменная частота,

$$\omega_{pl}(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m}};$$

$n(r)$ — пространственное распределение электронной плотности в атоме. Подставляя (7.31) в (6.89), находим

$$W_{\text{tot}}^{(\text{ph})} = \frac{\sqrt{\pi} e}{\sqrt{m \hbar}} \int_0^{\infty} |E(\omega_{pl}(r), \varphi)|^2 \sqrt{n(r)} r^2 dr, \quad (7.32)$$

где $|E[\omega_{pl}(r), \varphi]|^2$ — квадрат модуля Фурье-образа электрического поля в импульсе (6.101), вычисленный на локальной плазменной частоте, в котором явно указана зависимость от СЕ-фазы. Для анализа величины фазовых эффектов в полной вероятности фотовозбуждения ультракороткими лазерными импульсами введем коэффициент фазовой модуляции по формуле:

$$K_{\text{tot}}^{(\text{ph})} = 2 \frac{W_{\text{tot}}^{(\text{ph})}(\varphi = 0) - W_{\text{tot}}^{(\text{ph})}(\varphi = \pi/2)}{W_{\text{tot}}^{(\text{ph})}(\varphi = 0) + W_{\text{tot}}^{(\text{ph})}(\varphi = \pi/2)}. \quad (7.33)$$

Коэффициент фазовой модуляции полной вероятности фотопоглощения атомом с зарядом $Z = 30$, рассчитанный в рамках статистической модели для электронной плотности, представлен на рис. 7.5 для трех длительностей возбуждающих импульсов как функция несущей частоты. Напомним, что безразмерный параметр n_c представляет собой число периодов на несущей частоте в импульсе излучения (6.104).

Видно, что заметная зависимость вероятности фотопоглощения от СЕ-фазы имеет место только для $n_c < 0,5$, как и в случае связанно-связанного перехода. Коэффициент фазовой модуляции для фиксированного параметра n_c возрастает с ростом несущей частоты. Отметим, что вероятность фотопоглощения на высокочастотной границе интервала, представленного на рис. 7.5, составляет 15 % от своего максимального значения, отвечающего в данной модели частоте $\omega_{\max} = 0,4$ ат. ед.

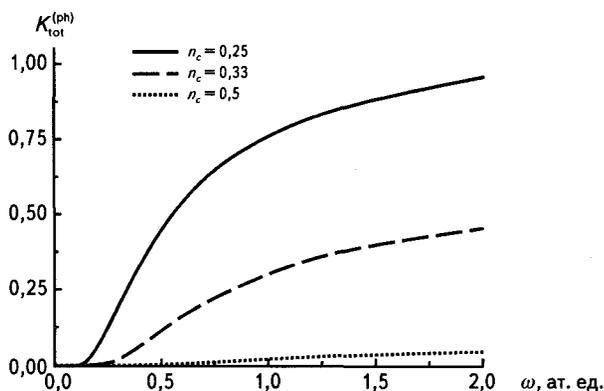


Рис. 7.5. Коэффициент фазовой модуляции для полной вероятности фотопоглощения ультракороткого импульса атомом как функция несущей частоты

Выражение для полной вероятности фотопоглощения (6.89) можно применить для случая взаимодействия ультракороткого импульса с *металлической наносферой* в диэлектрической среде. В случае, когда длина волны излучения намного превосходит радиус наночастицы r_s , ее динамическая поляризуемость может быть описана с помощью формулы Лоренца (5.66):

$$\beta_s(\omega) = \varepsilon_m \frac{\varepsilon_s(\omega) - \varepsilon_m}{\varepsilon_s(\omega) + 2\varepsilon_m} r_s^3, \quad (7.34)$$

$\varepsilon_s(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость металла наночастицы; ε_m — диэлектрическая проницаемость матрицы. Отсюда с помощью оптической теоремы (5.25) можно найти сечение фотопоглощения в дипольном приближении и по формуле (6.89) вычислить полную вероятность фотопоглощения за все время действия импульса.

Результаты вычислений вероятности фотопоглощения ультракороткого импульса серебряной наночастицей в стеклянной матрице приведены на рис. 7.6 для двух значений СЕ-фазы. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости серебра восстановлена с помощью данных по действительной и мнимой части показателя преломления.

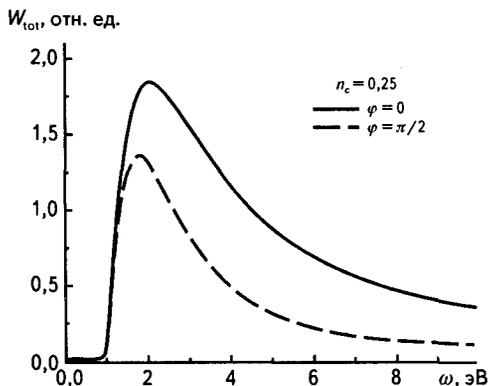


Рис. 7.6. Полная вероятность фотопоглощения ультракороткого импульса ($n_c = 0,25$) на серебряной сфере ($r_s = 5,3$ нм) как функция несущей частоты для двух значений СЕ-фазы

Видно, что в данном случае ($n_c = 0,25$) имеется существенная зависимость фотопоглощения от СЕ-фазы, особенно для энергий фотона на несущей частоте, превосходящих энергию в максимуме. С увеличением длительности импульса излучения зависимость вероятности от фазы становится менее заметной и для $n_c > 0,5$ практически исчезает.

В ряде случаев для возбуждения квантовой системы используется последовательность одинаковых импульсов, разделенных временным промежутком T (не путать с обозначением периода колебаний). Нетрудно получить Фурье-образ напряженности электрического поля такой последовательности, состоящей из N одинаковых импульсов, через Фурье-образ одиночного импульса $E(\omega)$:

$$E_N(\omega) = \frac{\sin(\omega TN/2)}{\sin(\omega T/2)} \exp\left[i \frac{(N-1)\omega T}{2}\right] E(\omega). \quad (7.35)$$

Подставляя (7.35) в правую часть равенства (6.89), находим вероятность фотовозбуждения квантового перехода под действием N одинаковых импульсов

$$W_{21}(N) = \frac{c}{4\pi^2\hbar} \int \frac{\sigma_{21}(\omega)}{\omega} \left[\frac{\sin(\omega TN/2)}{\sin(\omega T/2)} \right]^2 |E(\omega)|^2 d\omega. \quad (7.36)$$

Применим полученные выражения для описания фотоионизации атома водорода под действием серии коротких импульсов. В этом случае сечение процесса $\sigma_{21}(\omega)$ дается формулой Зоммерфельда, которую можно записать в виде [см. также (7.8)]:

$$\sigma_H \left(\nu = \frac{\hbar\omega}{Ry} \right) = \frac{2^9 \pi^2 a_B^2}{3 \cdot 137 \cdot \nu^4} \frac{\exp \left(-\frac{4 \operatorname{arctg} \sqrt{\nu-1}}{\sqrt{\nu-1}} \right)}{1 - \exp \left(-2\pi/\sqrt{\nu-1} \right)}, \quad (7.37)$$

где $a_B \cong 0,53 \text{ \AA}$ — радиус Бора; $Ry \cong 13,6 \text{ эВ}$ — ридберг.

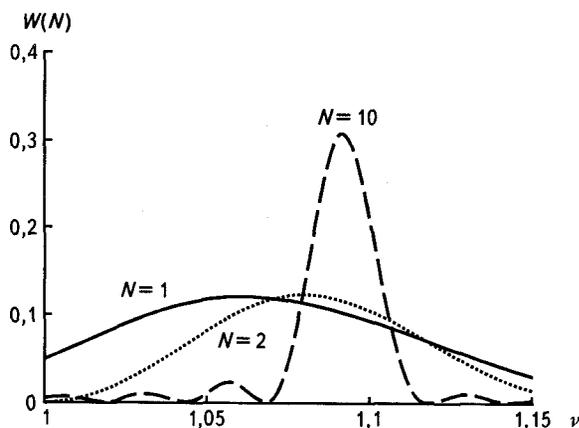


Рис. 7.7. Вероятность фотоионизации атома водорода под действием серии, состоящей из N двухцикловых лазерных импульсов

На рис. 7.7 представлены результаты расчета по формулам (7.36) и (7.37) для вероятности фотоионизации атома водорода серией ла-

зерных импульсов с длительностью два периода колебаний на несущей частоте. По оси абсцисс отложена величина

$$\nu = \frac{\varepsilon}{Ry} + 1,$$

где $\varepsilon = \hbar\omega - Ry$ — энергия ионизированного электрона.

Видно, что с ростом числа импульсов спектральная зависимость вероятности фотовозбуждения сужается около максимального значения, определяемого из равенства $\omega T = 2\pi k$ (k — натуральное число). Поскольку энергия выбитого из атома электрона равна $Ry(\nu - 1)$, а число этих электронов пропорционально вероятности $W(N)$, то из приведенного рисунка следует, что, изменяя параметры серии возбуждающих импульсов, можно управлять энергетическим спектром фотоэлектронов.

7.2. ФОТОИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

Современные лазерные установки позволяют получать интенсивности излучения, существенно превосходящие характерную атомную интенсивность $I_a = 3,52 \cdot 10^{16}$ Вт/см², что достигается с помощью сжатия лазерных импульсов во времени вплоть до длительностей пико- и фемтосекундного диапазона. В табл. 7.2 приведены параметры основных мощных лазерных установок со сверхкороткой длительностью импульса τ , созданных как в России, так и за рубежом [5].

Для столь высоких интенсивностей излучения необходимое условие применимости теории возмущений по взаимодействию электромагнитного поля с атомными электронами ($F \ll F_a \cong 5 \cdot 10^9$ В/см) может нарушаться. В данном разделе используем обозначение для напряженности электрического поля F , принятое в теории фотопроцессов в сильных полях. Как будет видно из дальнейшего, в ряде радиационных явлений необходимое условие применимости теории возмущений должно быть дополнено достаточным условием, так как вышеприведенное неравенство на амплитуду поля, вообще говоря, не является достаточным.



Таблица 7.2. Параметры мощных лазерных установок со сверхкороткой длительностью импульса

Фирма, страна	λ , мкм	τ , фс	P , 10^{12} Вт	I , Вт/см ²
Lawrence Livermore Nat. Lab. (USA)	1,06	500	1000	$>10^{20}$
California Univ. (USA)	0,78	30	50	5×10^{19}
Michigan Univ. (USA)	0,78	30	40	2×10^{19}
Texas Univ. (USA)	0,78	35	20	2×10^{17}
Rutherford Lab. (Great Britain)	1,06	500	1000	$>10^{20}$
Astra (Great Britain)	0,8	40	40	3×10^{18}
Institute of Laser Engineering. (Japan)	1,06	500	1000	10^{20}
Jap. Atomic Energy Agency (Japan)	0,78	30	500	10^{20}
MBI (Berlin, Germany)	0,78	30	100	10^{19}
ATLAS (Germany)	0,78	100	30	5×10^{18}
LULI (France)	0,78	30	100	5×10^{19}
LOA (France)	0,78	30	100	5×10^{19}
Lund (Sweden)	0,78	30	30	10^{19}
Changhai Inst. Opt. (China)	1,06	500	1000	10^{20}
ИПФ (г. Нижний Новгород, Россия)	0,78	40	560	10^{20}
НИКИ ОЭП (г. Сосновый Бор, Россия)	1,06	1000	40	10^{19}
ЦНИИмаш (г. Королев, Россия)	1,06	1500	10	2×10^{18}
ГОИ (г. Санкт-Петербург, Россия)	1,06	1500	5	10^{18}
ИОФАН (г. Москва, Россия)	0,78	40	0,5	10^{18}
МГУ (г. Москва, Россия)	0,78	55	0,4	10^{18}
ВНИИТФ (г. Челябинск, Россия)	1,06	1500	5	10^{18}

Модель Келдыша

Рассмотрим фотоионизацию атома в сильном электромагнитном поле в рамках подхода, предложенного Л.В. Келдышем в 1964 г. [6]. Пусть начальное состояние атомного электрона (до воздействия излучения) описывается волновой функцией Ψ_i , а конечное — волновой функцией Ψ_f . Данные функции являются точными решениями нестационарного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi. \quad (7.38)$$

где, как и в разд. 6.2, \hat{H}_0 — гамильтониан атома без учета электромагнитного взаимодействия; $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$ — оператор электромагнитного взаимодействия. Поскольку в начальный момент времени излучение отсутствовало, то вместо точной волновой функции Ψ_i можно использовать приближенную функцию $\Psi_i^{(0)}$, которая является решением уравнения Шредингера без учета электромагнитного взаимодействия. Тогда в соответствии с общим квантово-механическим формализмом точная амплитуда перехода системы из начального состояния в конечное состояние под воздействием излучения (амплитуда фотоионизации) имеет вид:

$$c_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \Psi_f(\mathbf{r}, t') \hat{V}(\mathbf{r}, t') \Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, t') d\mathbf{r} dt'. \quad (7.39)$$

Вероятность фотоионизации на связанно-свободном переходе $i \rightarrow f$ дается квадратом модуля амплитуды (7.39). Отметим, что выражение (7.39) эквивалентно исходному уравнению Шредингера (7.38). Для оператора электромагнитного взаимодействия можно использовать форму длины (6.8), полагая напряженность электрического поля не зависящей от радиуса-вектора (дипольное приближение). Дипольное приближение применимо в рассматриваемом случае, поскольку размер атома много меньше длины волны излучения видимого диапазона.

Поскольку точное решение Ψ_f уравнения (7.38) невозможно получить в явном виде, то для вывода формул для вероятности фотоионизации в сильном электромагнитном поле необходимо различного рода приближенные подходы. Один из них был предложен Л.В. Келдышем для случая, когда напряженность внешнего поля

мала по сравнению с характерной атомной напряженностью $F < F_a$. Как будет видно из дальнейшего, даже в этом случае теория возмущений оказывается применимой далеко не всегда, а лишь для достаточно высокочастотного внешнего поля. Основная идея метода Келдыша состоит в том, что точная волновая функция непрерывного спектра Ψ_f фотоионизированного электрона заменяется на так называемую волковскую волновую функцию $\Psi_p^{(v)}$ (здесь p — обобщенный импульс электрона). При использовании оператора электромагнитного взаимодействия в форме длины волковская волновая функция имеет вид

$$\Psi_p^{(v)}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right] \mathbf{r} - \frac{i}{2m\hbar} \int_0^t \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t') \right]^2 dt' \right\}, \quad (7.40)$$

где $e = -|e|$; m — заряд и масса электрона; p — обобщенный импульс; $\mathbf{A}(t)$ — векторный потенциал, который определяет напряженность электрического поля \mathbf{F} электромагнитной волны по формуле

$$\mathbf{F} = -\frac{1}{c} \frac{d\mathbf{A}}{dt}.$$

Волковская волновая функция (7.40) не учитывает взаимодействия электрона с атомным остатком. Она описывает колебания свободного нерелятивистского электрона в поле электромагнитной волны. Средняя по времени кинетическая энергия этих колебаний (пондеромоторная энергия) в случае линейно-поляризованного излучения с частотой ω равна

$$U_p = \frac{e^2 F^2}{4m\omega^2},$$

а для циркулярно-поляризованного излучения —

$$U_p = \frac{e^2 F^2}{2m\omega^2}.$$

Заметим, что характерная скорость колебаний электрона в поле монохроматической волны дается выражением

$$v_\omega = \frac{|e| F}{m\omega},$$

которое непосредственно следует из второго закона Ньютона. При интенсивностях излучения $I > I_r = 5 \cdot 10^{18}$ Вт/см² скорость колебаний электрона в поле электромагнитной волны на оптических частотах приближается к скорости света, поэтому значение I_r называют релятивистской интенсивностью.

Подставляя функцию (7.40) в формулу (7.39), получаем приближенное выражение для амплитуды фотоионизации:

$$c_{pi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \Psi_p^{(V)}(\mathbf{r}, t') \hat{V}(\mathbf{r}, t') \Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, t') d\mathbf{r} dt'. \quad (7.41)$$

В подходе Келдыша предполагается, что энергия фотона лазерного излучения много меньше энергии ионизации атома E_i : $\hbar\omega = E_i$. Последнее неравенство означает, что в процессе фотоионизации атомом должно быть поглощено большое число фотонов. С учетом вышесказанного и неравенства $F < F_a$ можно получить аналитическое выражение для амплитуды фотоионизации. Вывод соответствующей формулы опирается на метод перевала при вычислении интеграла по времени в правой части равенства (7.41). В случае монохроматического линейно поляризованного электромагнитного поля без учета предэкспоненциального множителя формула Келдыша для вероятности фотоионизации в единицу времени имеет вид:

$$w_{ph}^{(0)} = \frac{me^4}{\hbar^3} \exp \left\{ -\frac{2E_i}{\hbar\omega} \left[\left(1 + \frac{1}{2\gamma^2} \right) \ln \left(\gamma + \sqrt{1 + \gamma^2} \right) - \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{2\gamma} \right] \right\}, \quad (7.42)$$

где γ — безразмерная величина, называемая параметром Келдыша,

$$\gamma = \frac{\omega \sqrt{2mE_i}}{|e|F}. \quad (7.43)$$

Показатель экспоненты в (7.42) зависит от двух безразмерных величин: параметра Келдыша γ и отношения потенциала ионизации к энергии фотона

$$N_0 = \frac{E_i}{\hbar\omega}.$$

Для нецелого N_0 величина $K = \langle N_0 \rangle + 1$ ($\langle \dots \rangle$ — целая часть числа) отвечает минимальному количеству фотонов, которое должен поглотить атом для ионизации (без учета влияния поля излучения на

потенциал ионизации). По исходному предположению метода Келдыша $\hbar\omega \ll E_i$, т. е. $N_0 \gg 1$, и фотоионизация в рассматриваемом случае носит *нелинейный характер*. Напомним, что линейным называется фотопроцесс, в ходе которого поглощается или излучается один фотон электромагнитного поля. Если же таких фотонов несколько, фотопроцесс является нелинейным.

Выражение для вероятности нелинейной ионизации (7.42) не зависит от вида потенциала атомного остатка. В этом смысле оно является универсальным. Параметр Келдыша равен отношению характерной скорости атомного электрона в связанном состоянии

$$v_i = \sqrt{\frac{2E_i}{m}}$$

к скорости колебаний ионизированного электрона в поле электромагнитной волны

$$v_\omega = \frac{|e|F}{m\omega}$$

или корню квадратному из отношения потенциала ионизации к удвоенной пондеромоторной энергии:

$$\gamma = \sqrt{\frac{E_i}{2U_p}}$$

Туннельный и многофотонный режимы фотоионизации

Параметр Келдыша определяет характер процесса нелинейной фотоионизации. Если $\gamma^2 \ll 1$, то реализуется т.н. *туннельный режим*, в противоположном случае $\gamma^2 \gg 1$ — *многофотонный режим*. Иными словами, туннельный режим достигается, если энергия колебаний электрона в поле электромагнитной волны много больше энергии ионизации, а многофотонный режим, если выполняется обратное соотношение. Отсюда также следует, что туннельный режим соответствует низкочастотному пределу, а многофотонный режим отвечает высокочастотному пределу во взаимодействии электромагнитного излучения с атомом. Физически туннельный режим, как это следует из его названия, отвечает описанию фотоионизации атома

как процесса туннелирования электрона под потенциальным барьером, образованным атомным потенциалом и электрическим полем излучения. В многофотонном режиме фотоионизация представляется как одновременное поглощение атомом нескольких (N) фотонов. При этом поглощенной энергии должно хватить для удаления связанного электрона атома в непрерывный спектр

$$N\hbar\omega > E_i + U_p \equiv E_i(F).$$

В приведенном неравенстве учтено увеличение потенциала ионизации атома в сильном поле на величину пондеромоторной энергии. В многофотонном режиме вероятность фотоионизации может быть рассчитана в рамках теории возмущений. В туннельном режиме такой подход неприменим, хотя при этом может оказаться, что неравенство на величину электрического поля в излучении $F \ll F_a \equiv 5 \cdot 10^9$ В/см выполняется.

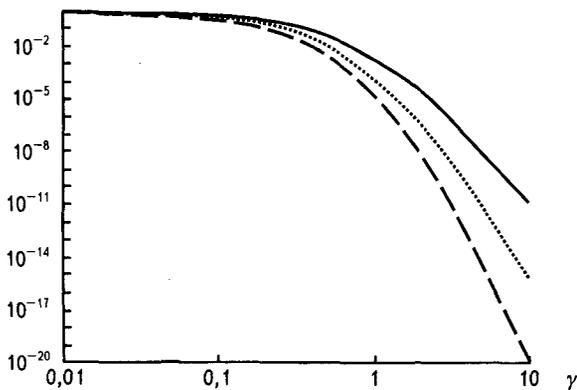


Рис. 7.8. Зависимость вероятности фотоионизации от величины параметра Келдыша для различных значений отношения $N_0 = E_i/\hbar\omega$: сплошная кривая — $N_0 = 5$; пунктирная — $N_0 = 7$; штриховая — $N_0 = 9$

На рис. 7.8 представлены зависимости вероятности фотоионизации, рассчитанные по формуле (7.42), от величины параметра Келдыша для различных значений отношения $N_0 = E_i/\hbar\omega$. Ордината отложена в атомных единицах. Видно, что в туннельном режиме ($\gamma \ll 1$) вероятность фотоионизации практически не зависит от N_0 и γ . При переходе в многофотонный режим вероятность фотоионизации па-

дает с ростом γ , причем это падение сильнее выражено для больших значений N_0 . Поскольку параметр Келдыша (7.43) пропорционален частоте излучения, то можно сделать вывод о том, что в туннельном режиме вероятность фотоионизации атома практически не зависит от частоты.

Для численных оценок величины параметра Келдыша определение (7.43) удобно переписать в следующем виде:

$$\gamma^2 = \left(\frac{1,24}{\lambda \cdot 27,2} \right)^2 \left(\frac{137}{8 \cdot \pi} \right) \frac{E_i/13,6}{I/3,5 \cdot 10^{16}}, \quad (7.43a)$$

где λ — длина волны излучения в микронах; E_i — потенциал ионизации атома в электронвольтах; I — интенсивность излучения в Вт/см². Равенство (7.43a), как и весь подход Келдыша, строго говоря, справедливо для умеренных интенсивностей излучения, не превосходящих атомную интенсивность: $I < I_a = 3,5 \cdot 10^{16}$ Вт/см², и, кроме того, $\hbar\omega = E_i$. При записи (7.43a) была использована связь между энергией фотона в электронвольтах и длиной волны излучения в микронах: $\hbar\omega = 1,24/\lambda$ и выражение для интенсивности монохроматического излучения

$$I = \frac{cF^2}{8\pi}$$

(c — скорость света, которая в атомных единицах примерно равна 137). Зависимости параметра Келдыша для фотоионизации атома водорода ($E_i = 13,6$ эВ) от интенсивности излучения на разных длинах волн, построенные по формуле (7.43a), представлены на рис. 7.9. Абсцисса на этом рисунке отложена в Вт/см².

Отметим, что длина волны $\lambda = 1,06$ мкм отвечает излучению лазера на алюмоиттриевом гранате с активными ионами неодима, $\lambda = 0,53$ мкм — вторая гармоника этого излучения, которая получается с помощью преобразования частоты, и $\lambda = 10,6$ мкм — длина волны излучения CO₂ лазера.

Из рис. 7.9 следует, что туннельный режим фотоионизации ($\gamma^2 \ll 1$) для длинноволнового излучения ($\lambda = 10,6$ мкм) достигается при существенно более низкой интенсивности (порядка $5 \cdot 10^{12}$ Вт/см²), чем для коротких длин волн ($\lambda = 0,53, 1,06$ мкм), когда переход в туннельный режим происходит при $I \approx 10^{15}$ Вт/см².

Если разложить волковскую волновую функцию конечного состояния электрона (7.40) в ряд Фурье, то можно учесть и предэкспоненциальный фактор в выражении для нелинейной фотоионизации. Так, для фотоионизации основного состояния атома водорода Л.В. Келдыш получил следующее выражение [7]:

$$w_{\text{ph}}^{(\text{Keld})} = \frac{\hbar^2}{me^4} \sqrt{\hbar\omega E_i} \frac{\gamma^{3/2}}{(1 + \gamma^2)^{3/4}} S w_{\text{ph}}^{(0)}, \quad (7.44)$$

где S представляет собой сумму по числу поглощенных фотонов, имеющую весьма громоздкий вид, вероятность $w_{\text{ph}}^{(0)}$ определяется формулой (7.42).

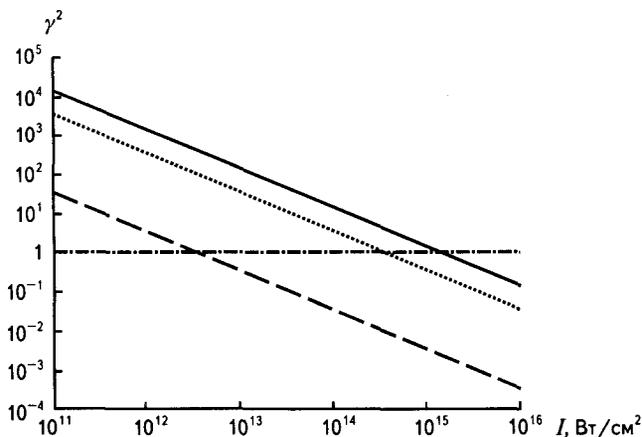


Рис. 7.9. Зависимость квадрата параметра Келдыша для фотоионизации атома водорода от интенсивности излучения на разных длинах волн: сплошная кривая — $\lambda = 0,53$ мкм; пунктирная — $\lambda = 1,06$ мкм; штриховая — $\lambda = 10,6$ мкм

В туннельном режиме, как уже отмечалось, исчезает зависимость вероятности фотоионизации от частоты, и из формул (7.42), (7.44) можно получить следующее выражение для вероятности фотоионизации в единицу времени (в атомных единицах $\hbar = m = e = 1$):

$$w_{\text{ph}}(\gamma^2 \ll 1) = \frac{\sqrt{3}}{2^{9/4} \sqrt{\pi}} E_i \left(\frac{F}{E_i^{3/2}} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{2(2E_i)^{3/2}}{3F} \right\}. \quad (7.45)$$

Данное выражение имеет тот же вид, что и в случае фотоионизации атома монохроматическим полем низкой частоты после усреднения по периоду его колебаний. Видно, что помимо степенного (по амплитуде поля) фактора (7.45) содержит экспоненциальную зависимость от обратной величины амплитуды электрического поля.

В многофотонном режиме, когда $\gamma^2 \gg 1$ (слабое поле и/или высокая частота), общая формула (7.44) для вероятности нелинейной фотоионизации сводится к простому выражению, которое в атомных единицах имеет вид:

$$w_{\text{ph}}(\gamma^2 \gg 1) = \left(\frac{\sqrt{\epsilon} F}{2\omega \sqrt{2E_i}} \right)^{2N_0}, \quad (7.46)$$

где $N_0 = E_i/\hbar\omega$; e — основание натурального логарифма. Видно, что в этом случае зависимость вероятности фотоионизации от амплитуды поля носит степенной характер. Другим важным отличием многофотонного режима фотоионизации (7.46) от туннельного режима (7.45) является сильная зависимость вероятности процесса от частоты.

С учетом определения параметра Келдыша (7.43) формулу (7.46) можно переписать в виде:

$$w_{\text{ph}}(\gamma^2 \gg 1) \propto (\gamma^{-2})^{N_0}, \quad (7.46a)$$

откуда следует, что в многофотонном режиме вероятность нелинейной ионизации мала (см. рис. 7.8, область больших значений γ).

Выражение, аналогичное (7.46), может быть получено в рамках теории возмущений по электрон-фотонному взаимодействию (см. разд. 6.2). Действительно, в первом неисчезающем порядке теории возмущений имеет место формула

$$w_{\text{ph}} \propto (F)^{2K},$$

где K — минимальное число фотонов, необходимое для ионизации атома (без учета пондеромоторной энергии U_p , которой можно пренебречь в режиме $\gamma^2 \gg 1$),

$$K = \left\langle \frac{E_i}{\hbar\omega} \right\rangle + 1.$$

Таким образом, при рассмотрении нелинейной фотоионизации атома в сильном электромагнитном поле в рамках подхода Келдыша

критерий применимости теории возмущений реализуется при больших значениях параметра Келдыша ($\gamma^2 \gg 1$). Условие малости амплитуды электрического поля ($F \ll F_a \cong 5 \cdot 10^9$ В/см) в данном случае оказывается недостаточным.

Как это следует из рис. 7.9, в оптическом диапазоне частот для больших интенсивностей излучения (порядка атомной интенсивности) реализуется туннельный режим фотоионизации, при котором согласно формуле (7.45) зависимость от частоты исчезает. В этом случае можно анализировать процесс нелинейной фотоионизации в приближении постоянного электрического поля. Точное выражение для вероятности ионизации основного состояния атома водорода (в единицу времени) под действием постоянного электрического поля имеет вид [7]:

$$w_H = 4 \frac{me^4}{\hbar^3} \sqrt{\frac{3F_a}{\pi F}} \exp\left\{-\frac{2F_a}{3F}\right\}, \quad (7.47)$$

где F_a — атомная единица напряженности электрического поля,

$$F_a = \frac{m^2 e^5}{\hbar^4} \cong 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см.}$$

Видно, что формула (7.47) отличается от своего аналога (7.45), полученного в рамках подхода Келдыша, предэкспоненциальным множителем. Данное отличие связано с тем, что волковская функция (7.40), использовавшаяся при выводе равенства (7.45), не учитывает кулоновского поля ядра атома.

Подбарьерная и надпороговая фотоионизация

Зависимость потенциальной энергии атомного электрона от расстояния до ядра в присутствии постоянного электрического поля схематически показана на рис. 7.10 для сферически-симметричного состояния невозмущенного атома. Ось z выбрана в направлении вектора напряженности внешнего поля. На этом рисунке сплошными линиями представлены кулоновский потенциал атомного остатка ($U_{ат}$), потенциальная энергия электрона в постоянном однородном электрическом поле (V) и полная энергия связанного электрона в невозмущенном атоме ($-E_i$). Последняя выбрана равной 5,14 эВ, что соответствует энергии ионизации атома натрия. Штриховая кривая отвечает потенциальной энергии атомного электрона в случае

так называемой *подбарьерной ионизации* постоянным электрическим полем. Ширина потенциального барьера Δz может быть определена путем приравнивания полной энергии электрона в невозмущенном атоме его потенциальной энергии в присутствии электрического поля. В результате получается следующее равенство для ширины потенциального барьера

$$\Delta z = \frac{\sqrt{E_i^2 - 4Z|e|^3 F}}{|e| F}, \quad (7.48)$$

где Z — заряд атомного остатка. Подбарьерная ионизация характерна для амплитуды электрического поля, меньшей атомного значения $F < F_a$. Это неравенство предполагалось выполненным при выводе формул для нелинейной фотоионизации в рамках метода Келдыша. Таким образом, туннельный режим фотоионизации, для которого «работает» приближение постоянного поля, может быть описан как туннелирование атомного электрона под потенциальным барьером, образованным атомным остатком и лазерным полем, с последующим уходом на бесконечность.

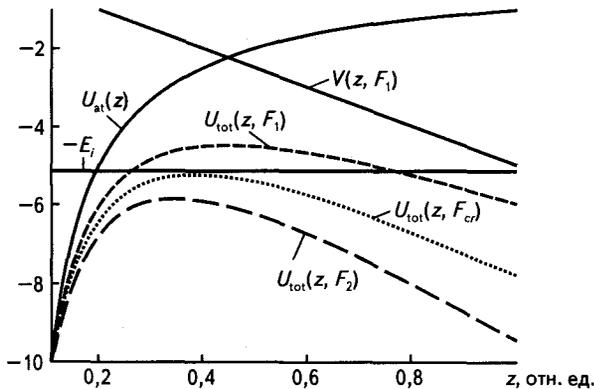


Рис. 7.10. Потенциальная энергия атомного электрона в постоянном электрическом поле:

пунктир отвечает случаю туннельной ионизации; *штрихпунктир* — критическому значению амплитуды внешнего поля; *штриховая кривая* — случай надбарьерной ионизации; *горизонтальная прямая* отвечает уровню энергии связанного электрона в отсутствие внешнего поля; *сплошная кривая* — атомный потенциал; *наклонная прямая* — потенциал электрона в однородном электрическом поле

Из формулы (7.48) следует, что ширина барьера уменьшается с ростом напряженности внешнего электрического поля. При некотором критическом значении напряженности электрического поля F_{cr} она обращается в ноль:

$$\Delta z(F_{cr}) = 0.$$

Из формулы (7.48) легко найти, что

$$F_{cr} = \frac{E_i^2}{4Z|e|^3} \quad (7.49)$$

и для критической интенсивности излучения

$$I_{cr} = \frac{cF_{cr}^2}{8\pi}$$

имеем:

$$I_{cr} = \frac{cE_i^4}{128\pi Z^2 e^6}. \quad (7.50)$$

Критической напряженности электрического поля отвечает штрихпунктирная кривая рис. 7.9, которая касается горизонтальной прямой, изображающей энергию электрона в невозмущенном атоме. Для интенсивностей излучения, выше критической $I > I_{cr}$, имеет место *надбарьерная ионизация* атомного электрона. Этот процесс происходит за времена порядка периода обращения электрона по атомной орбите. Как видно из формулы (7.50), значение критической интенсивности излучения сильно зависит от энергии ионизации атома (E_i). При переходе от атома натрия ($E_i = 5,14$ эВ) к атому гелия ($E_i = 24,6$ эВ) величина I_{cr} возрастает примерно в 500 раз.

Применимость приближения постоянного поля для описания фотоионизации в туннельном режиме на качественном уровне можно понять, если учесть, что параметр Келдыша γ имеет также смысл отношения времени туннелирования под потенциальным барьером, изображенном на рис. 7.10, к периоду колебаний электромагнитного поля. Поэтому при малом значении γ поле излучения в первом приближении можно считать постоянным.

При высоких напряженностях электромагнитного поля в ходе фотоионизации атом может поглотить число фотонов N , большее их минимально возможного количества

$$K = \left\langle \frac{E_i(F)}{\hbar\omega} \right\rangle + 1,$$

разрешенного законом сохранения энергии ($E_i(F)$ — потенциал ионизации атома с учетом влияния внешнего поля F):

$$N = K + S, \tag{7.51}$$

где $S > 0$ — дополнительное число поглощенных фотонов. Избыточное поглощение фотонов в процессе фотоионизации называется *надпороговой ионизацией*. Схематическое изображение этого явления приведено на рис. 7.11, где $K = 3$ и $S = 2$.

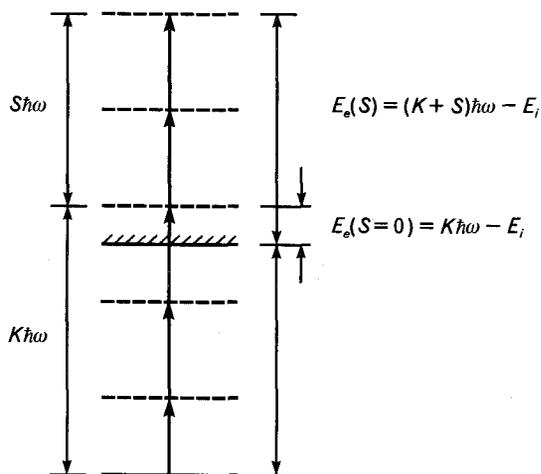


Рис. 7.11. Схематическое изображение надпороговой ионизации

Энергия фотоэлектрона при поглощении S дополнительных фотонов частоты ω в соответствии с законом сохранения энергии равна:

$$E_e(S) = (K + S)\hbar\omega - E_i(F). \tag{7.52}$$

Отсюда следует, что расстояние между максимумами в энергетическом спектре фотоэлектронов $E_e(S + 1) - E_e(S)$ равняется энер-

гии фотона $\hbar\omega$. В реальности энергия фотоэлектронов $E_e(S)$ размывается под действием ряда факторов, одним из которых является неоднородность электрического поля F в фокусе лазерного луча. Эта неоднородность приводит к разбросу значений энергии связи $E_i(F)$ электрона в атоме и, как это следует из равенства (7.52), к разбросу энергии фотоэлектронов.

Надпороговая ионизация экспериментально наблюдается в диапазоне интенсивностей $10^{12} - 10^{16}$ Вт/см². В течение длительного времени условия экспериментов по фотоионизации атомов в сильном поле отвечали многофотонному режиму ($\gamma^2 \gg 1$). Попытки выполнить наблюдение при более высокой интенсивности излучения, обеспечивающей условие $\gamma < 1$, наталкивались на принципиальную трудность. Дело в том, что эксперименты проводились с лазерными импульсами пикосекундной длительности ($1 \text{ пс} = 10^{-12} \text{ с}$). В этом случае все атомы в мишени оказывались ионизированными уже на фронте импульса, еще до того, как интенсивность излучения достигнет значений, отвечающих туннельному режиму. Решение проблемы оказалось возможным с созданием лазерных систем, генерирующих импульсы с длительностью в фемтосекундном диапазоне ($1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$). В таких ультракоротких импульсах большинство атомов мишени остаются нейтральными до прибытия центральной, наиболее интенсивной, части импульса.

На рис. 7.12 изображен экспериментальный спектр энергии электронов, возникающий при фотоионизации атома ксенона под действием лазерного импульса с длительностью 40 фс и интенсивностью $6,0 \cdot 10^{13}$ Вт/см². Такое излучение генерируется с помощью лазера, активная среда которого представляет сапфир Al_2O_3 с внедренными в него ионами титана Ti^{3+} , на которых и происходит усиление излучения. Центр линии усиления этого лазера приходится на длину волны 780 нм, что соответствует энергии фотона 1,59 эВ. Потенциал ионизации атома ксенона E_i составляет 12,13 эВ. Отсюда легко найти, что минимально возможное количество поглощенных фотонов $K = \langle E_i/\hbar\omega \rangle + 1$ без учета пондеромоторной энергии равно 8. С ростом интенсивности излучения будет возрастать потенциал ионизации атома $E_i(F)$ и соответственно число K .

Результаты большого числа экспериментов показали, что спектры надпороговой ионизации различных атомов имеют универсальную структуру, характеристики которой определяются главным образом лазерным полем. Наиболее существенные черты этих спект-



ров можно увидеть на рис. 7.12. Энергетический спектр фотоэлектронов состоит из пиков, отстоящих друг от друга на энергию фотона и соответствующих поглощению определенного числа дополнительных фотонов S . Из-за вышеописанного размытия энергии фотоэлектронов пики перекрываются, так что возникает «пьедестал», на фоне которого просматриваются максимумы небольшой величины. Высота пиков, т. е. количество регистрируемых электронов, сначала быстро убывает с увеличением энергии электрона. В районе энергии $2U_p$ убывание резко замедляется, и дальше спектр убывает очень медленно. Этот протяженный участок получил название *высокоэнергетического плато надпороговой ионизации*. Плато резко обрывается вблизи энергии $10U_p$. Для оценок величины пондеромоторной энергии удобно использовать соотношение:

$$U_p \text{ (эВ)} = 1,43 \cdot 10^{-13} I \text{ (Вт/см}^2\text{)} \omega^{-2} \text{ (эВ)}. \quad (7.53)$$



Рис. 7.12. Экспериментальный спектр надпороговой ионизации в ксеноне. Интенсивность излучения титан-сапфирового лазера $6,0 \cdot 10^{13}$ Вт/см², длительность импульса 40 фс (<http://faculty.physics.tamu.edu/ggp>)

Для ситуации, представленной на рис. 7.11, формула (7.53) дает $U_p = 3,4$ эВ, так что $2U_p = 6,8$ эВ — начало плато и $10U_p = 34$ эВ — обрыв плато.

Участок спектра энергии фотоэлектронов от 0 до $2U_p$ определяется так называемой *прямой* ионизацией под действием лазерного

поля, когда вырванный из атома электрон попадает в детектор без какого-либо дополнительного взаимодействия. В рамках полуклассического подхода для вероятности прямой ионизации с заданной энергией фотоэлектрона E_e можно получить следующее простое соотношение

$$w_{\text{ph}}(E_e) \propto \exp \left\{ -\frac{2F_a}{3F\sqrt{1 - E_e/2U_p}} \right\}. \quad (7.54)$$

Максимум распределения (7.54) приходится на малые энергии, и для $F_a/F \gg 1$ распределение $w_{\text{ph}}(E_e)$ быстро убывает с ростом E_e , что хорошо согласуется с начальным участком экспериментального спектра надпороговой ионизации на рис. 7.12.

Высокоэнергетическое плато надпороговой ионизации, простирающееся от энергии фотоэлектронов $2U_p$ до энергии $10U_p$, определяется процессом *перерасеяния фотоэлектрона на родительском ионе*. (Родительский ион — ион, возникший в результате отрыва рассматриваемого электрона от атома.) Перерасеяние заключается в том, что ионизированный электрон под действием электрического поля излучения может вернуться к родительскому иону, рассеяться на нем и поглотить при этом дополнительные фотоны, увеличив тем самым свою энергию, регистрируемую фотодетектором.

Наряду с изучением электронных спектров важное значение для научных и технических приложений имеет исследование спектра электромагнитного излучения из газообразной мишени, облучаемой теми же лазерными импульсами, с которыми наблюдается надпороговая ионизация. В ходе этих исследований было найдено, что спектр излучения состоит из большего числа нечетных гармоник лазерной частоты $\Omega_{2k+1} = (2k+1)\omega$ (k — натуральное число). Зарегистрированы гармоники вплоть до трехсотой. Это явление получило название *генерации высоких гармоник*. Оказалось, что в спектре гармоник тоже имеется плато: интенсивность первых гармоник быстро убывает с увеличением номера, но, начиная с некоторого номера, интенсивности гармоник имеют сравнимую величину. Этот участок спектра простирается вплоть до четко выраженной верхней границы

$$\hbar\Omega_{\text{max}} = 3,17U_p + E_i. \quad (7.55)$$

Излучение с частотами $\Omega_k > \Omega_{\text{max}}$ сильно подавлено. Физической основой возникновения плато в генерации гармоник служит также



явление перерасеяния ионизируемого электрона на родительском ионе, в ходе которого электрон приобретает дополнительную энергию, которая затем излучается в виде гармоник высокого порядка.

Генерация высоких гармоник позволяет преобразовывать лазерное излучение видимого диапазона с энергией фотона порядка одного электрон-вольта в излучение с энергией фотона несколько сотен электрон-вольт, что соответствует мягкому рентгеновскому диапазону, представляющему огромный интерес для химии, биологии и медицины.

Другая многообещающая перспектива связана с использованием генерируемых в процессе перерасеяния гармоник для получения высокочастотных электромагнитных импульсов с длительностью меньше периода колебания поля в лазерном излучении [8]. Идея состоит в том, что суммарное поле совокупности гармоник, имеющих одинаковую начальную фазу, испытывает биения, и при этом могут возникать сильные короткие всплески с длительностью меньше лазерного периода порядка нескольких десятков аттосекунд (1 аттосекунда равняется 10^{-18} с). Для сравнения отметим, что атомная единица времени равна 24 аттосекундам. Таким образом, эксперименты с импульсами аттосекундного диапазона открывают возможность наблюдать атомно-молекулярную динамику в масштабе реального времени.

Литература

1. *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987, 272 с.
2. *Буреева Л.А., Лисица В.С.* Возмущенный атом. М.: ИздАТ, 1997, 464 с.
3. *Brandt W., Lundqvist S.* Atomic Oscillations in the Statistical Approximation. *Phys. Rev.* 1965. V. 139, p. A612—A617.
4. *Rost J.M.* Analytical total photo cross section for atoms. *J. Phys.* B. 995. V. 28, pp. L601—L606.
5. *Матафонов А.П.* Инициирование перспективных ядерных реакций синтеза при взаимодействии интенсивных лазерных импульсов с твердотельными мишенями. Докторская диссертация. Королев, МО, 2009, с. 8.
6. *Келдыш Л.В.* Ионизация в поле сильной электромагнитной волны. *ЖЭТФ*, 1964. Т. 47, № 5 (11), с. 1945—1957.
7. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. М.: Физматлит, 2001, 311 с.
8. *Krausz F., Ivanov M.* Attosecond physics. *Rev. Mod. Phys.* 2009. V. 81, pp. 163—234.

8.1. РАССЕЯНИЕ ФОТОНА НА СВОБОДНОМ ЭЛЕКТРОНЕ

Рассеяние фотона можно интерпретировать как виртуальное поглощение падающего фотона и одновременное излучение рассеянного фотона. Рассмотрим сначала простейший случай такого процесса, когда фотон рассеивается на свободном электроне. Строго говоря, модель свободного (не взаимодействующего с окружением) электрона всегда является приближенной. Тем не менее это приближение в ряде случаев может хорошо выполняться. Более того, как мы увидим в дальнейшем, даже связанный электрон при определенных условиях в процессе рассеяния может считаться свободным.

Рассеяние фотона с частотой ω и волновым вектором k на свободном электроне сопровождается изменением частоты $\omega \rightarrow \omega'$ и волнового вектора $k \rightarrow k'$. Если ввести угол рассеяния фотона θ (рис. 8.1), то на основании закона сохранения энергии-импульса можно получить следующую связь между изменением частоты и углом рассеяния фотона:

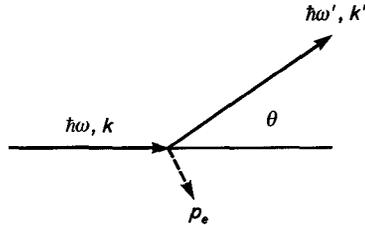


Рис. 8.1. Рассеяние фотона на покоящемся электроне (p_e — импульс отдачи электрона)

$$\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{mc^2} (1 - \cos \theta), \quad (8.1)$$

где m — масса электрона; c — скорость света. Множитель перед круглыми скобками в правой части равенства (8.1) может быть

переписан в виде $\lambda_c/2\pi c$, где λ_c — комптоновская длина волны электрона,

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} \cong 2,42 \cdot 10^{-10} \text{ см.}$$

Из выражения (8.1) легко видеть, что при нулевом угле рассеяния $\theta = 0$ изменение частоты фотона равно нулю $\omega = \omega'$. Если же $\theta \neq 0$, то частота рассеянного фотона оказывается меньше его первоначальной частоты $\omega < \omega'$, поскольку часть энергии фотона передается рассеивающему электрону (энергия «отдачи»). Уменьшение частоты отвечает увеличению длины волны излучения, так что рассеяние фотона на ненулевой угол сопровождается увеличением его длины волны.

С помощью стандартных правил квантовой электродинамики [1] для сечения рассеяния фотона на свободном электроны в лабораторной системе отсчета (связанной с электроном) можно получить следующее выражение (формула Кляйна—Нишины—Тамма):

$$d\sigma = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - \sin^2 \theta \right) d\Omega', \quad (8.2)$$

где r_e — так называемый классический радиус электрона,

$$r_e = \frac{e^2}{mc^2} \cong 2,82 \cdot 10^{-13} \text{ см;}$$

$d\Omega'$ — элемент телесного угла в направлении волнового вектора рассеянного фотона.

Если $\hbar\omega \ll mc^2$, то, как это следует из (8.1), изменение частоты мало по сравнению с самой частотой $|\Delta\omega| \ll \omega$, и в равенстве (8.2) можно положить $\omega \approx \omega'$. Тогда из выражения (8.2) получается известная нерелятивистская формула Томсона для дифференциального по углу сечения рассеяния фотона на покоящемся свободном электроны:

$$d\sigma^{(Th)} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \theta) \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 d\Omega'. \quad (8.3)$$

Видно, что в данном случае величина сечения определяется квадратом классического радиуса электрона, т. е. является весьма малой величиной.

Интегральное по углу рассеяния сечение в случае произвольной энергии фотона может быть получено из (8.2):

$$\sigma(x) = 2\pi r_e^2 \frac{1}{x} \left\{ \left(1 - \frac{4}{x} - \frac{8}{x^2} \right) \ln(1+x) + \frac{1}{2} + \frac{8}{x} - \frac{1}{2(1+x)^2} \right\}, \quad (8.4)$$

где

$$x = \frac{2\hbar\omega}{mc^2}.$$

Нормированное на квадрат классического радиуса электрона сечение рассеяния (8.4) приведено на рис. 8.2.

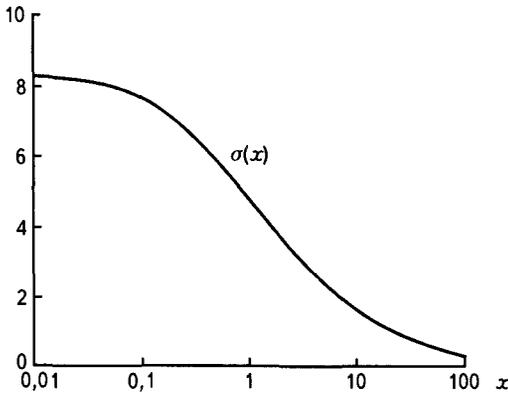


Рис. 8.2. Нормированное сечение рассеяния фотона на свободном электро-
не в широком интервале энергий фотона, $x = \frac{2\hbar\omega}{mc^2}$

В нерелятивистском пределе малой энергии фотона, когда $x \ll 1$, первые члены разложения правой части равенства (8.4) дают:

$$\sigma = \sigma^{(\text{Th})} \left(1 - \frac{2\hbar\omega}{mc^2} \right), \quad \hbar\omega \ll mc^2. \quad (8.5)$$

Здесь введено интегральное по углу томсоновское сечение рассеяния фотона на электро-не, которое равно

$$\sigma^{(\text{Th})} = \frac{8\pi r_e^2}{3}.$$



Данное обстоятельство иллюстрируется рис. 8.2, на котором видно, что нормированное сечение рассеяния в пределе малой энергии фотона равно $8\pi/3 \cong 8,378$. Точка перегиба кривой, изображенной на рис. 8.2, отвечает примерному равенству энергии фотона энергии покоя электрона, когда $x = 1$.

В ультррелятивистском случае $x \gg 1$, когда энергия фотона много больше энергии покоя электрона $\hbar\omega \gg mc^2$, из (8.4) можно получить

$$\sigma = \pi r_e^2 \frac{mc^2}{\hbar\omega} \left[\ln \left(\frac{2\hbar\omega}{mc^2} \right) + \frac{1}{2} \right], \quad (8.6)$$

т. е. сечение рассеяния уменьшается обратно пропорционально энергии фотона.

Отметим, что в ультррелятивистском пределе дифференциальное сечение рассеяния имеет в лабораторной системе отсчета резкий максимум по направлению первоначального распространения фотона. В нерелятивистском же случае, как это видно из формулы (8.3), распределение рассеянного излучения носит дипольный характер.

8.2. РАССЕЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ НА АТОМЕ

Классическое описание процесса

В рамках классической картины при воздействии электромагнитного излучения на атом связанные атомные электроны начинают колебаться, что согласно известным электродинамическим законам приводит к излучению вторичной или рассеянной электромагнитной волны. На квантовом языке этот процесс представляет собой рассеяние фотона на атомном электроны, в ходе которого атомный электрон виртуально возбуждается в некоторое промежуточное атомное состояние, переходя в конечном итоге в стационарное состояние. (Под виртуальным возбуждением понимается переход электрона в состояние с другой энергией, за которым «мгновенно» следует обратный переход в стационарное состояние с первоначальной или другой энергией.) Если это конечное стационарное состояние совпадает с начальным состоянием, то имеет место *рэлеевское* рассеяние, если же нет, то говорят о *комбинационном рассеянии* излучения. Возможна также ситуация, возникающая при рассеянии рентгеновских лучей, когда атомный электрон в ходе рассеяния фотона ионизируется. Этот процесс называется *комптоновским рассеянием* фотона на атомном электроны.

Остановимся сначала на рэлеевском рассеянии излучения на атоме. Чтобы не прибегать к квантово-механическому формализму, для описания данного процесса можно воспользоваться принципом спектроскопического соответствия. Согласно этому принципу атом при взаимодействии с излучением ведет себя как совокупность осцилляторов с частотами, равными собственным частотам атомных электронов. Эти осцилляторы называются осцилляторами переходов, поскольку каждый из них соответствует некоторому переходу между двумя стационарными состояниями электрона в атоме. Подробно принцип спектроскопического соответствия рассматривается в гл. 4.

Для расчета сечения рэлеевского рассеяния исходим из выражения для мощности дипольного излучения, возникающего в результате воздействия на атом электромагнитной волны [2]:

$$Q(t) = \frac{2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}(t)|^2, \quad (8.7)$$

где c — скорость света; две точки над вектором дипольного момента обозначают дифференцирование по времени. Критерий применимости дипольного приближения, в рамках которого получена формула (8.7), может быть сформулирован в виде следующего неравенства:

$$\lambda \gg a, \quad (8.8)$$

где a — размер области пространства, ответственной за излучение; λ — длина волны излучения. В случае атома, когда $a \approx 10^{-8}$ см, условие (8.8) охватывает широкий диапазон длин волн вплоть до жесткого рентгеновского излучения.

Выражение (8.7) описывает мгновенную мощность излучения в данный момент времени t . На эксперименте измеряется мощность, усредненная по периоду колебания поля в электромагнитной волне $T = 2\pi/\omega$, вызывающей осцилляции дипольного момента. В случае монохроматического излучения из равенства (8.7) после несложного математического преобразования (см. разд. 4.3) следует формула для средней мощности излучения:

$$\langle Q(t) \rangle_T = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n; \quad (8.9)$$

$$Q_n = \frac{4}{3c^3} |(\ddot{\mathbf{d}})_n|^2, \quad (8.10)$$



где $(\ddot{d})_n$ — n -я гармоника Фурье от второй производной дипольного момента. Используя периодичность колебаний дипольного момента, с помощью Фурье-преобразования можно получить мощность излучения на частоте периодического движения электрона ω ($n = 1$) в виде

$$Q \equiv Q_{n=1} = \frac{4\omega^4}{3c^3} |d_\omega|^2. \quad (8.11)$$

Если теперь в (8.11) подставить равенство (5.10) и воспользоваться формулой для интенсивности монохроматического излучения через Фурье-гармонику напряженности электрического поля

$$I = \frac{c}{2\pi} |E_\omega|^2, \quad (8.12)$$

то для сечения рэлеевского рассеяния излучения на атоме, находящемся в i -м состоянии, можно получить

$$\sigma_i^{(\text{Rsc})}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left| \frac{\omega^2}{c^2} \beta_i(\omega) \right|^2, \quad (8.13)$$

где $\beta_i(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома в i -м состоянии. Подробное рассмотрение динамической поляризуемости приведено в гл. 5.

Приведем для сравнения классическую формулу Томсона для сечения рассеяния излучения на свободном электроне

$$\sigma_{sc}^{(\text{Th})}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2. \quad (8.14)$$

Рассмотрим различные предельные случаи выражения для сечения рассеяния излучения на атоме (8.13). Первый случай соответствует рассеянию низкочастотного излучения, когда выполняется неравенство $\omega \ll \omega_{ni}$ — частота излучения много меньше частот перехода атома из исходного состояния в возбужденные. В этом пределе сечение рассеяния дается формулой, аналогичной (8.13), в которую будет входить независящая от частоты статическая поляризуемость атома $\beta_0 = \beta(\omega = 0)$. Таким образом, из выражения (8.13) следует, что в низкочастотном пределе сечение рассеяния возрастает как 4-я степень частоты, что, в частности, определяет голубой цвет неба (рассеянного в воздухе излучения Солнца).

Резонансное рассеяние излучения на атоме происходит, если частота излучения близка к одной из собственных атомных частот. Тогда предыдущие формулы дают

$$\sigma_i^{(\text{res sc})}(\omega \approx \omega_{ni}) = \frac{2\pi}{3} f_{ni}^2 r_e^2 \frac{\omega_{ni}^2}{(\omega - \omega_{ni})^2 + (\delta_{ni}/2)^2}, \quad (8.15)$$

где $r_e \approx 2,8 \cdot 10^{-13}$ см — классический радиус электрона. В случае точного резонанса при естественном уширении перехода, когда $(\delta_{ni})_{\text{ест}} = A_{ni}$ (A_{ni} — коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения), из равенства (8.15) следует, что

$$\sigma_i^{(\text{res sc})}(\omega = \omega_{ni}) \approx \lambda_{ni}^2, \quad (8.16)$$

т. е. сечение резонансного рассеяния примерно равно квадрату длины волны излучения, что в оптическом диапазоне на несколько порядков превышает геометрический размер атома.

Наконец, в высокочастотном пределе, когда можно пренебречь собственными частотами атома по сравнению с частотой излучения, формулы (5.7) и (8.13) приводят к выражению

$$\sigma_i^{(\text{R sc})}(\omega \gg \omega_{ni}) = \frac{8\pi}{3} r_e^2 N_a^2, \quad (8.17)$$

где N_a — число атомных электронов. При выводе (8.17) было использовано «золотое» правило сумм для сил осцилляторов:

$$\sum_n f_{ni} = N_a. \quad (8.18)$$

Условие высокочастотного приближения $\omega \gg \omega_{ni}$ может быть переписано в виде

$$\omega \gg \frac{I_P}{\hbar},$$

где I_P — потенциал ионизации атомной оболочки, дающей наибольший вклад в сечение рассеяния.

Рэлеевское сечение рассеяния в высокочастотном пределе (8.17), полученное в дипольном приближении, пропорционально квадрату числа атомных электронов. Это отражает тот факт, что при выполнении дипольного условия (8.8) электронный заряд атома осциллирует

как единое целое под действием электромагнитной волны. В результате вторичное излучение, приводящее к рассеянию, когерентно по вкладам всех атомных электронов. Эта когерентность и выражается в наличии множителя N_a^2 в сечении процесса.

Для одного атомного электрона равенство (8.17) совпадает с формулой Томсона (8.14), полученной для сечения рассеяния излучения на свободном электроне. Это не случайно, поскольку условие $\omega \gg \omega_{ni}$, использовавшееся при выводе (8.17), как раз и означает пренебрежение связью между атомным электроном и ядром.

Вышеприведенные сечения описывают рассеяние фотона в полный телесный угол. Это т.н. интегральные сечения. Для получения дифференциального сечения, описывающего рассеяние фотона на сферически-симметричной системе в заданный телесный угол ($\Omega' + d\Omega'$), достаточно умножить интегральные сечения на множитель, типичный для угловой зависимости дипольного излучения,

$$\frac{3(1 + \cos^2 \theta)}{16\pi},$$

где θ — угол между волновым вектором падающего излучения \mathbf{k} и волновым вектором рассеянного излучения \mathbf{k}' . Тогда вместо формулы (8.17) имеем

$$\frac{d\sigma_i^{(\text{R sc})}(\omega \gg \omega_{ni})}{d\Omega'} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 N_a^2. \quad (8.19)$$

Отсюда видно, что максимум сечения приходится на рассеяние фотона вперед $\theta = 0$ и назад $\theta = 180^\circ$.

Выражение (8.19) справедливо для сферически-симметричных систем в дипольном приближении, когда изменение волнового вектора излучения в результате рассеяния $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ мало по сравнению с атомным импульсом, т. е.

$$|r_j| |\Delta\mathbf{k}| \ll 1.$$

Оно может быть обобщено на недипольный случай посредством замены $N_a \rightarrow n(\Delta\mathbf{k})$, где $n(\Delta\mathbf{k})$ — пространственный Фурье-образ электронной плотности в атоме. Последнее означает, что рассеяние излучения «тестирует» распределение электронной плотности внутри атома. В рамках квантово-механического формализма Фурье-об-

раз $n(\Delta\mathbf{k})$ равен атомному форм-фактору в заданном электронном состоянии:

$$n(\Delta\mathbf{k}) \rightarrow n_{ii}(\Delta\mathbf{k}) \equiv F_i(\Delta\mathbf{k}) = \left\langle i \left| \sum_j \exp(i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \right| i \right\rangle, \quad (8.20)$$

где сумма вычисляется по всем электронам атома, а символ $\langle i | \dots | i \rangle$ представляет собой дираковскую запись матричного элемента (интеграл от оператора \dots , вычисленный с атомными волновыми функциями $\psi_i(\mathbf{r}_j)$). Из равенства (8.20) непосредственно вытекает, что при выполнении дипольного условия (8.8) $F_i(\Delta\mathbf{k}) \equiv N_a$, поскольку тогда показатели экспонент в сумме (8.8) малы.

В приближении экспоненциальной экранировки, когда электронная плотность спадает с ростом расстояния до ядра на характерной длине R_a (средний атомный радиус), атомный форм-фактор и соответственно Фурье-образ электронной плотности равны:

$$F_i(\Delta\mathbf{k}) = \frac{N_a}{1 + \Delta\mathbf{k}^2 R_a^2}. \quad (8.21)$$

Радиус R_a для многоэлектронных атомов может быть положен равным радиусу Томаса—Ферми

$$R_a \equiv r_{\text{TF}} = \frac{b\hbar^2}{\sqrt[3]{Z} m_e e^2},$$

где $b \approx 0,8853$; Z — зарядовое число атомного ядра.

Из приведенного выражения и формул (8.17), (8.19) следует, что при выполнении условия (противоположного дипольному)

$$|\Delta\mathbf{k}| > R_a^{-1}$$

сечение рэлеевского рассеяния излучения на атоме начинает убывать из-за потери когерентности вкладов различных атомных электронов в процессе рассеяния. Итак, в общем случае вместо (8.19) имеем выражение для дифференциального сечения рэлеевского рассеяния в высокочастотном пределе:

$$\frac{d\sigma_j^{(\text{Rsc})}(\omega \gg \omega_{ni})}{d\Omega'} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 |n_{ii}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2. \quad (8.22)$$

Как следует из (8.20)–(8.22), даже при нарушении дипольного условия (8.8) дипольное выражение для сечения (8.19) «работает», если угол рассеяния мал.

Формула (8.22) справедлива для случая рассеяния излучения на нерелятивистских электронах, что мы и предполагаем. Заметим, что при рэлеевском рассеянии частота излучения остается неизменной, несмотря на то, что значительный импульс $\Delta p = \hbar \Delta k$ передается от фотона атому. Данное обстоятельство связано с тем, что избыток импульса Δp поглощается в конечном итоге не атомным электроном, а ядром, из-за большой массы которого энергия отдачи мала.

В случае комбинационного рассеяния, когда состояние атома изменяется, сечение процесса может быть выражено через тензор рассеяния — величину, являющуюся обобщением динамической поляризуемости. Частота излучения при комбинационном рассеянии изменяется на величину, равную изменению энергии атома.

Квантовое описание рассеяния излучения на атоме

Квантовое описание рассеяния излучения на атоме базируется на использовании теории возмущений для двухфотонных процессов, рассмотренной в разд. 6.5. С помощью изложенного там подхода несложно обобщить выражение для двухфотонного поглощения (6.39) на случай *вынужденного рассеяния*. Вынужденное рассеяние возникает в том случае, когда испускание вторичного (рассеянного) фотона является процессом, индуцированным внешним полем. Выражение для амплитуды вынужденного рассеяния в случае, когда вынуждающее поле совпадает с рассеиваемым, можно получить из формулы (6.32), если учесть положительно- и отрицательно-частотные вклады в матричные элементы оператора возмущения (6.17). Производя стандартные преобразования, которые привели к формулам (6.39) и (6.40), находим:

$$w_{fi}^{(\text{scat})} = 2\pi G_{fi}(0) \left| A_{fi}^{(\text{scat})} \right|^2, \quad (8.23)$$

где $A_{fi}^{(\text{scat})}$ — амплитуда рассеяния,

$$\begin{aligned} A_{fi}^{(\text{scat})} &= \frac{1}{\hbar} \left[\langle f | \hat{V} G(E_i - \hbar\omega) \hat{V}^* | i \rangle + \langle f | \hat{V}^* G(E_i + \hbar\omega) \hat{V} | i \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{\tilde{V}_{fn} \tilde{V}_{ni}^*}{\hbar(\omega_{ni} + \omega - i\gamma_{ni})} + \frac{\tilde{V}_{fi}^* \tilde{V}_{ni}}{\hbar(\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni})} \right]. \end{aligned} \quad (8.24)$$

При получении (8.23) и (8.24) было учтено, что положительно- и отрицательно-частотные части матричного элемента взаимодействия дают два слагаемых в амплитуду процесса. В правую часть (8.23) входит функция формы линии на нулевой частоте, которая в случае однородного уширения равна:

$$G_{fi}^{(h)}(0) = \frac{\gamma_{fi}/\pi}{\omega_{fi}^2 + \gamma_{fi}^2}. \quad (8.25)$$

Для переходов в дискретном спектре справедливо неравенство: $|\omega_{fi}| \gg \gamma_{fi}$, поэтому в рассматриваемом случае можно положить $\omega_{fi} = 0$, т. е. вынужденное рассеяние происходит без возбуждения квантовой системы, тогда

$$G_{fi}^{(h)}(0) = G_{ii}^{(h)}(0) = \frac{1}{\pi\gamma_{ii}}. \quad (8.26)$$

Суммирование по промежуточным состояниям в амплитудах двух-фотонных процессов включает суммирование по вырожденным состояниям и интегрирование по непрерывному спектру энергий. Переходы из начального и конечного состояний квантовой системы в промежуточные называют *виртуальными переходами*. В отличие от реальных переходов виртуальные не имеют место в действительности, а являются скорее способом интерпретации полученных формул.

Подставляя в (8.23) и (8.24) явный вид оператора возмущения (6.18), находим:

$$w_{fi}^{(\text{scat})} = \frac{(2\pi)^3 u^2}{\hbar^2 g_i} G_{fi}(0) \left| \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{(\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e} \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} + \frac{(\mathbf{e} \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega - i\gamma_{ni}} \right] \right|^2, \quad (8.27)$$

где u — пространственная плотность энергии излучения,

$$u = \frac{E_0^2}{8\pi};$$

\mathbf{e} — единичный вектор поляризации поля; g_i — статистический вес начального уровня энергии.

Вынужденное рассеяние можно интерпретировать как совокупность двух процессов: виртуального возбуждения квантовой системы с последующим вынужденным излучением (первое слагаемое в

квадратных скобках) и виртуальное вынужденное излучение фотона с последующим его поглощением [второе слагаемое в квадратных скобках (8.27)].

Спонтанное рассеяние отличается от вынужденного тем, что виртуальное излучение фотона является спонтанным процессом, т. е. вызывается полем вакуумных флуктуаций. Вакуумное поле в отличие от заданного внешнего поля имеет произвольную частоту, является изотропным и неполяризованным. Поэтому для описания спонтанного рассеяния частоту излучаемого фотона в формуле (8.27) нужно считать произвольной, так же как вектор поляризации и направление излучения. Квадрат плотности энергии поля, фигурирующий в выражении (8.27), нужно заменить на следующее произведение:

$$u^2 \rightarrow u \frac{du_{\text{vac}}}{d\omega' d\Omega'} = u \frac{\hbar(\omega')^3}{8\pi^3 c^3}, \quad (8.28)$$

где $d\Omega'$ — телесный угол в направлении излучения спонтанного фотона. Правая часть равенства (8.29) записана для заданной поляризации спонтанного фотона. С учетом сказанного для вероятности спонтанного рассеяния вместо (8.27) имеем:

$$\begin{aligned} & \frac{dw_{fi}^{(\text{scat})}}{d\omega' d\Omega'} = \\ & = \frac{u(\omega')^3}{\hbar c^3 g_i} G_{fi}(\omega - \omega') \left| \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{(e^* \mathbf{d}_{fn})(e \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} + \frac{(e \mathbf{d}_{fn})(e^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega' - i\gamma_{ni}} \right] \right|^2. \end{aligned} \quad (8.29)$$

Аргумент в функции формы линии, естественно, обращается в ноль при $\omega = \omega'$. Разделив правую часть этого выражения на поток фотонов в рассеиваемом излучении

$$j_{\omega}^{\text{ph}} = \frac{cu}{\hbar\omega}$$

и интегрируя по частоте ω' , приходим к формуле для сечения рассеяния электромагнитного поля на квантовой системе:

$$\frac{d\sigma_{fi}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega(\omega')^3}{\hbar^2 c^4 g_i} \left| \sum_n \left[\frac{(e^* \mathbf{d}_{fn})(e \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} + \frac{(e \mathbf{d}_{fn})(e^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega' - i\gamma_{ni}} \right] \right|^2, \quad (8.30)$$

причем $\omega' = \omega - \omega_{fi}$. При выводе (8.30) функция формы линии была заменена на дельта-функцию. Сечение (8.30) является дифференциальным по телесному углу вылета рассеянного фотона.

Формула (8.30) описывает рассеяние излучения, которое может сопровождаться одновременным возбуждением/девозбуждением квантовой системы. Рассеяние в случае $\omega_{fi} \neq 0$ называется *комбинационным*, если же $\omega_{fi} = 0$, то имеет место *рэлеевское* рассеяние. Заметим, что формула (8.30) была получена Крамерсом и Гейзенбергом до создания квантовой механики.

Выражение (8.30) удобно переписать в виде:

$$\frac{d\sigma_{fi}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega(\omega')^3}{c^4 g_i} \left| e^l (e^{**})^s c_{fi}^{ls}(\omega', \omega) \right|^2, \quad (8.31)$$

где $c_{fi}^{ls}(\omega', \omega)$ — тензор рассеяния электромагнитного поля на квантовой системе,

$$c_{fi}^{ls}(\omega', \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{(\mathbf{d}_{fn})^l (\mathbf{d}_{ni})^s}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} + \frac{(\mathbf{d}_{fn})^s (\mathbf{d}_{ni})^l}{\omega_{ni} + \omega' - i\gamma_{ni}} \right]; \quad (8.32)$$

l, s — трехмерные векторные индексы, по которым в формуле (8.31) предполагается суммирование.

В случае рэлеевского рассеяния, когда $\omega_{fi} = 0$, тензор рассеяния переходит в *тензор поляризуемости*:

$$c_{fi}^{ls} \rightarrow \beta_i^{ls}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{d_{in}^l d_{ni}^s}{\omega_{ni} - \omega - i\gamma_{ni}} + \frac{d_{in}^s d_{ni}^l}{\omega_{ni} + \omega - i\gamma_{ni}} \right]. \quad (8.33)$$

Напомним, что тензор поляризуемости осуществляет связь между вектором электрического дипольного момента и напряженностью электрического поля частоты ω :

$$d_i^l(\omega) = \beta_i^{ls}(\omega) E^s(\omega). \quad (8.34)$$

Здесь подразумевается суммирование по индексу s .

В случае сферически-симметричного состояния квантовой системы тензор поляризуемости превращается в скаляр:

$$\beta_i^{ls}(\omega) = \beta_i(\omega) \delta^{ls}.$$

Тогда можно показать, что выражение (8.33) совпадает с (5.14), если воспользоваться явным видом для силы осциллятора (4.51) и учесть связь между константами затухания:

$$\delta_{in} = 2\gamma_{in}.$$

С учетом сказанного для дифференциального сечения рэлеевского рассеяния квантовой системы, находящейся в сферически-симметричном состоянии, находим:

$$\frac{d\sigma_{ii}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega^4}{c^4} |\beta_i(\omega)|^2 \langle (e'^* e)^2 \rangle. \quad (8.35)$$

Просуммируем это выражение по поляризациям рассеянного фотона с помощью формулы:

$$2 \langle (e'^* e)^2 \rangle = \sin^2 \theta,$$

в которой усреднение проводится по всем возможным направлениям вектора e' при заданном угле θ между векторами e и n' (n' — единичный вектор в направлении рассеянного фотона). В результате имеем:

$$\frac{d\sigma_{ii}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega^4}{c^4} |\beta_i(\omega)|^2 [1 - (n'e)^2]. \quad (8.36)$$

В случае неполяризованного падающего излучения формулу (8.36) нужно усреднить по направлению вектора e , после чего получаем

$$\frac{d\sigma_{ii}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega^4}{c^4} |\beta_i(\omega)|^2 \frac{1 + (n'n)^2}{2}, \quad (8.37)$$

где n — единичный вектор в направлении падающего фотона. При выводе (8.36) использовалось правило усреднения:

$$\langle e^l e^s \rangle = \frac{\delta^{ls} - n^l n^s}{2}.$$

Выражение (8.37) описывает сечение рэлеевского рассеяния излучения на сферически-симметричной системе как функцию частоты ω и угла рассеяния $\theta = \arccos(n'n)$. На высоких частотах $\omega \gg \omega_a$

(ω_a — характерная частота переходов в дискретном спектре), когда поляризуемость дается формулой (5.16), равенство (8.37) сводится к виду:

$$\frac{d\sigma_{ii}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = N_e^2 r_e^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2}, \quad (8.38)$$

где θ — угол рассеяния; N_e — число электронов в квантовой системе; r_e — классический радиус электрона,

$$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Заметим, что полученное на основании квантового подхода выражение (8.38) тождественно результату классического рассмотрения рассеяния в высокочастотном приближении (8.19).

В случае $N_e = 1$ выражение (8.38) совпадает с формулой Томсона для сечения рассеяния излучения на свободном электроне. Это совпадение не случайно, так как для свободного электрона нет связанных состояний, поэтому $\omega_a = 0$, и условие высокочастотного приближения выполняется автоматически. Квадрат числа N_e , фигурирующий в (8.37), отвечает когерентности рассеяния фотона всеми электронами квантовой системы. Когерентность рассеяния есть следствие использовавшегося при выводе всех формул данной главы дипольного приближения (1.21). В противоположном пределе $\lambda \ll a$ когерентность нарушается и N_e^2 в формуле (8.37) следует заменить на N_e .

В противоположном пределе низких частот, когда динамическую поляризуемость можно заменить статическим значением, сечение рэлеевского рассеяния возрастает как четвертая степень частоты, как это следует из формул (8.34)—(8.37).

Пусть частота рассеиваемого излучения близка к одной из собственных частот перехода в квантовой системе, так что выполняется неравенство:

$$|\omega - \omega_{ni}| \leq \gamma_{ni}. \quad (8.39)$$

Тогда в сумме по промежуточным состояниям в формуле (8.30) можно оставить одно резонансное слагаемое:

$$\frac{d\sigma_{fi}^{(\text{scat})}}{d\Omega'} = \frac{\omega(\omega')^3}{\hbar^2 c^4 g_i} \frac{\left| \sum_{M_n} (e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{d}_{fn}})(e \mathbf{d}_{ni}) \right|^2}{(\omega - \omega_{ni})^2 + \gamma_{ni}^2}. \quad (8.40)$$



Здесь оставлено суммирование по вырожденным состояниям резонансного уровня.

Явление, описываемое сечением (8.40), называется *резонансной флуоресценцией*. Рассмотрим рэлеевский случай, когда $\omega_{fi} = 0$ и, соответственно, частоты падающего и рассеянного фотона совпадают: $\omega = \omega'$. Предположим для простоты, что начальное состояние невырожденное $g_i = 1$. Тогда равенство (8.40) дает:

$$\frac{d\sigma_i^{(\text{RF})}}{d\Omega'} = \frac{1}{16} \left(\frac{c}{\omega_{ni}} \right)^2 \frac{A_{ni}^2 \left| (\mathbf{e}'^* \mathbf{e}) \right|^2}{(\omega - \omega_{ni})^2 + \gamma_{ni}^2}, \quad (8.41)$$

где A_{ni} — коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения, явное выражение для которого дается формулой (6.29).

В случае естественного уширения линии, когда полуширина определяется спонтанным излучением $\gamma_{ni} = A_{ni}/2$, и точного резонанса $\omega = \omega_{ni}$ из (8.41) имеем:

$$\frac{d\sigma_i^{(\text{RF})}}{d\Omega'} \propto \lambda^2. \quad (8.42)$$

Отсюда следует, что сечение резонансной флуоресценции в оптическом диапазоне в случае естественного уширения линии на многие порядки величины превосходит сечение рассеяния вдали от резонанса, порядок которого дается формулой (8.38). Заметим, что соотношение (8.42) было нами получено ранее [см. формулу (8.16)] на основании классического рассмотрения.

8.3. РАССЕЯНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АТОМЕ

Учет недипольности рассеяния

При рассеянии электромагнитного излучения рентгеновского диапазона $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$ ($k = 2\pi/\lambda \geq 10 \text{ \AA}^{-1}$) условие дипольного приближения (8.8), вообще говоря, нарушается, и вместо формулы (8.30) нужно использовать выражение, учитывающее волновые векторы падающего и рассеянного фотонов. Недипольный тензор рас-

сеяния, определяющий сечение рассеяния с помощью (8.31), имеет вид

$$c_{fi}^{hs}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{e^2}{m\omega'\omega} \left\{ \frac{m}{\hbar} \sum_n \left[\frac{j_{fn}^l(\mathbf{k}) j_{ni}^s(\mathbf{k}')}{\omega_{fn} + \omega - i0} + \frac{j_{fn}^s(\mathbf{k}') j_{ni}^l(\mathbf{k})}{\omega_{in} - \omega - i0} \right] - \delta^{ls} n_{fi}(\mathbf{q}) \right\}, \quad (8.43)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ — изменение волнового вектора фотона; δ^{lk} — символ Кронекера; $j^l(\mathbf{k})$, $\hat{n}(\mathbf{q})$ — Фурье-образы оператора плотности тока атомных электронов и оператора электронной плотности,

$$j^l(\mathbf{k}) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \left\{ \hat{p}_j^l \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \hat{p}_j^l \right\},$$

$$\hat{n}(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j);$$

$|i\rangle$, $|f\rangle$ — начальное и конечное состояния атома.

Заметим, что в высокочастотном (high-frequency) пределе, который можно определить неравенством $\hbar\omega \gg I$ (*) (I — характерный потенциал ионизации атома), основной вклад в тензор рассеяния дает второе слагаемое в фигурных скобках формулы (8.43). Сумма в квадратных скобках имеет порядок величины $(I/\omega)^2$. При выполнении высокочастотного условия (*) тензор рассеяния $c_{fi}^{hs}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ оказывается скаляром, равным

$$c_{fi}^{hf}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{e^2}{m\omega'\omega} n_{fi}(\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (8.44)$$

Подчеркнем, что условие высокочастотного предела $\hbar\omega \gg I$ выполняется для большинства атомных электронов в рентгеновском диапазоне энергий фотона, когда $\hbar\omega \geq 10$ кэВ. Исключение составляют электроны внутренних K -оболочек, а также L -оболочек тяжелых элементов с зарядовым числом $Z \geq 60$.

Подставляя выражение для тензора рассеяния в высокочастотном пределе (8.44) в формулу для сечения рассеяния (8.31) и усредняя по поляризациям фотонов, находим

$$d\sigma^{hf} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2 \vartheta) \left(\frac{\omega'}{\omega} \right) |n_{fi}(\mathbf{q})|^2 d\Omega'. \quad (8.45)$$

Полученное выражение отличается от классической формулы Томсона (4.3) наличием дополнительного множителя, пропорционального квадрату модуля матричного элемента от Фурье-образа оператора плотности атомных электронов, вычисленного на волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

Динамический форм-фактор атома

Выражение (8.45) должно быть дополнено равенством (8.31), выражающим закон сохранения энергии при рассеянии, которое удобно записать через дельта-функцию $\delta[\omega - \omega' + (E_i - E_f)/\hbar]$. Используя ее интегральное представление

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int \exp(ixt) dt$$

и определение гейзенберговского оператора

$$\hat{q}(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \hat{q} \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right),$$

можно получить следующее частотно-угловое сечение рассеяния фотона на атоме, находящегося в начальном состоянии $|i\rangle$, в *высоко-частотном приближении*:

$$\frac{d\sigma_i}{d\Omega' d(\Delta\omega)} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{\text{Th}} \left(\frac{\omega}{\omega'}\right) S_i(\Delta\omega, \mathbf{q}), \quad (8.46)$$

где $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{\text{Th}}$ дается формулой (4.3). В (8.46) введен динамический форм-фактор (ДФФ) атома $S_i(\Delta\omega, \mathbf{q})$, равный по определению [3]:

$$S_i(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\Delta\omega t} \langle i | \hat{n}(\mathbf{q}, t) \hat{n}(-\mathbf{q}) | i \rangle. \quad (8.47)$$

Как видно из (8.47), ДФФ представляет собой пространственно-временной Фурье-образ от корреляционной функции плотность-плотность атомных электронов. Динамический форм-фактор удовлетворяет ряду правил сумм, два из которых в случае водородоподобного атома имеют особенно простой вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(\omega, \mathbf{k}) d\omega = 1; \quad \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega, \mathbf{k}) \omega d\omega = \frac{\mathbf{k}^2 \hbar}{2m}. \quad (8.48)$$

Итак, частотно-угловое распределение рассеянных на атоме фотонов в высокочастотном приближении $\hbar\omega \gg I$ определяется формулой (8.46). Если же $\hbar\omega < I$, то выражение (8.46) становится, вообще говоря, несправедливым. В частности, при приближении частоты рассеивающегося излучения к одной из собственных частот атома возникает так называемое резонансное рассеяние, сечение которого имеет ярко выраженный максимум.

В случае рэлеевского рассеяния $|i\rangle = |f\rangle$ на водородоподобном атоме в основном состоянии диагональный матричный элемент $n_{ii}(\mathbf{q})$, входящий в выражение для сечения (8.45), легко вычисляется аналитически, и равенство (8.45) преобразуется к виду:

$$\frac{d\sigma_{ii}}{d\Omega'} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)^{\text{Th}} \frac{1}{[1 + a_{\text{H}}^2 q^2/4]^4}, \quad (8.49)$$

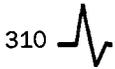
где a_{H} — характерный радиус водородоподобного иона,

$$a_{\text{H}} = \frac{\hbar^2}{Zme^2}.$$

Из приведенного выражения следует, что сечение рэлеевского рассеяния резко падает [как $(1/a_{\text{H}}q)^8$], если $q > a_{\text{H}}^{-1}$.

Таким образом, для больших (по сравнению с характерным атомным импульсом) импульсов отдачи рассеяние идет с изменением состояния атома. При этом, если атом ионизируется, тогда имеет место комптоновское рассеяние, если возбуждается в состояние дискретного спектра, то рассеяние является комбинационным (рамановским). Отметим, что сечение комбинационного рассеяния, возрстая при малых q от нуля, достигает своего максимума при $q \approx 1/a$ и затем уменьшается. Расчет для основного состояния водородоподобного атома показывает, что величина этого сечения всегда меньше величины его рэлеевского аналога и в максимуме зависимости от переданного волнового вектора q достигает значения порядка 20 % от томсоновского сечения.

В противоположном случае $q < a_{\text{H}}^{-1}$ рассеяние фотона с подавляющей вероятностью идет без изменения состояния атома. В этом можно убедиться с помощью формул (8.46) и (8.47). Действительно, при малых изменениях волнового вектора рассеивающегося фотона Фу-



рье-образ оператора электронной плотности равен числу атомных электронов

$$\hat{n}(q < a_H^{-1}) \equiv N.$$

Тогда из (8.47) следует, что ДФФ атома имеет вид

$$S_i = N^2 \delta(\omega - \omega'),$$

т. е. $\omega = \omega'$ и соответственно $E_i = E_f$. Отсюда также следует важный вывод о том, что при малых переданных импульсах рассеяние носит когерентный по вкладу атомных электронов характер, поэтому сечение процесса пропорционально числу электронов в квадрате. В случае больших переданных импульсов $q > 1/a$, напротив, рассеяние некогерентно, и его сечение пропорционально N в первой степени. Учитывая вышесказанное, можно предложить следующее приближенное выражение для ДФФ атома:

$$S(\Delta\omega, q) \approx \theta\left(\frac{1}{a} - q\right) N^2 \delta(\Delta\omega) + \theta\left(q - \frac{1}{a}\right) N \delta\left(\Delta\omega + \frac{\hbar q^2}{2m}\right). \quad (8.50)$$

Первое слагаемое в правой части этого равенства описывает когерентные процессы, происходящие при малой отдаче. Второе слагаемое в правой части (8.50) относится к некогерентным явлениям, когда избыток энергии-импульса, возникающий в ходе рассеяния, уносится ионизированным электроном.

Импульсное приближение в теории комптоновского рассеяния

Выше указывалось, что (за вычетом вклада внутренних K -оболочек) для описания рассеяния рентгеновских лучей на атоме можно использовать высокочастотное приближение (8.46), в рамках которого динамические свойства атома, существенные для рассеяния фотонов, определяются его динамическим форм-фактором (8.47). Как правило, ДФФ атома не может быть вычислен в общем виде. Качественная формула для ДФФ (8.50) не учитывает деталей электронного строения атома и слишком груба для сравнения с экспериментальными данными. В то же время существует приближенный метод вычисления сечения рассеяния рентгеновских лучей на атоме, который уже на ранних стадиях использовался для анализа экс-

периментальных данных. Это так называемое импульсное приближение (ИП), которое предполагает, что атомные электроны в ходе рассеяния на них рентгеновских лучей ведут себя в большей мере как свободные, нежели чем связанные. Точное определение ИП будет дано ниже.

Импульсное приближение для описания комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме, как это было в свое время показано Эйзенбергером и Платцманом [3], может быть получено из первых принципов. Для этого нужно воспользоваться выражением для ДФФ (8.47) и явным видом пространственного Фурье-образа от оператора электронной плотности

$$\hat{n}(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j).$$

В выражении для гейзенберговского оператора

$$\hat{n}(\mathbf{q}, t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{n}(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)$$

полный гамильтониан системы \hat{H} представляет собой сумму оператора кинетической \hat{T} и потенциальной \hat{V} энергии $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. (Напомним, что оператор потенциальной энергии коммутирует с оператором электронной плотности, а оператор кинетической энергии не коммутирует.) Далее выпишем известное разложение операторной экспоненты, входящей в определение ДФФ:

$$\exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i\hat{T}t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\hat{V}t}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{[\hat{T}, \hat{V}]t^2}{2\hbar^2}\right) \dots, \quad (8.51)$$

где $[\hat{A}, \hat{B}]$ — коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} ; многоточие обозначает экспоненты с многократными коммутаторами, содержащие более высокие степени параметра времени t . Равенство (8.51) фактически является разложением по степеням временного интервала t . Величина этого интервала ограничена сверху значением $1/\Delta\omega$, как это следует из формулы (8.47). Действительно, вклад в интеграл по времени в определении ДФФ для больших значений переменной t мал из-за сильных осцилляций экспоненты. Условие ИП дается равенством

$$\exp\left(-i\frac{[\hat{T}, \hat{V}]t^2}{2\hbar^2}\right) = 1, \quad (8.52)$$



согласно которому некоммутативностью операторов T и V можно пренебречь на временах, ответственных за процесс. Физически это означает, что за время рассеяния фотона потенциал, в котором движется атомный электрон, практически не изменяется. При выполнении (8.52) вкладом в разложение (8.51) экспонент с многократными коммутаторами можно пренебречь, так что выражение для ДФФ в импульсном приближении имеет вид

$$S_i^{IA}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\Delta\omega t} \langle i | e^{i\hat{T}t/\hbar} \hat{n}(\mathbf{q}) e^{-i\hat{T}t/\hbar} \hat{n}(-\mathbf{q}) | i \rangle, \quad (8.53)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Из данного равенства следует, что потенциал V исчезает из определения ДФФ в импульсном приближении. Подчеркнем, однако, что это не означает полного пренебрежения связи атомных электронов с ядром. В импульсном приближении, как уже отмечалось, потенциал V предполагается постоянным, и поэтому он взаимно уничтожается в выражениях для энергии начального и конечного состояний атома. Иными словами, энергия начального и конечного состояний ионизируемого электрона в рамках ИП измеряется по отношению к постоянному мгновенному значению потенциала V . Выражение (8.53) можно переписать, сделав вставку из суммы по полному набору волновых функций свободного движения (плоских волн) между операторами $\hat{n}(\mathbf{q})$ и $\exp(-i\hat{T}t/\hbar)$, и, воспользовавшись тем, что плоская волна является собственной функцией оператора $\exp(-i\hat{T}t/\hbar)$, тогда для ДФФ nl -й электронной подболочки атома имеем

$$S_{nl}^{IA}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{4\pi\hbar^3} \delta\left(\Delta\omega + \frac{(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{q})^2}{2m\hbar} - \frac{\varepsilon_{nl}}{\hbar}\right) |R_{nl}(p)|^2, \quad (8.54)$$

где ε_{nl} — энергия связи подболочки; $R_{nl}(p)$ — радиальная волновая функция электронной подболочки в импульсном представлении, определяемая выражением

$$R_{nl}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} R_{nl}(r) j_l(pr) r^2 dr. \quad (8.55)$$

Здесь $j_l(pr)$ — сферическая функция Бесселя первого рода; $R_{nl}(r)$ — нормированная радиальная волновая функция электронной подболо-

лочки. Если использовать связь между импульсом и энергией атомных электронов в квазисвободном приближении:

$$\frac{p^2}{2m} = \varepsilon_{nl}, \quad (8.56)$$

вместо (8.13) имеем

$$S_{nl}^{1A}(\Delta\omega, \mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{4\pi\hbar^3} \delta\left(\Delta\omega + \frac{\hbar q^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m}\right) |R_{nl}(p)|^2. \quad (8.57)$$

Как видно из этой формулы, сдвиг частоты при комптоновском рассеянии в рамках импульсного приближения связан с доплеровским сдвигом при рассеянии фотона на движущемся атомном электро-не [слагаемое $\mathbf{p}\mathbf{q}$ под знаком дельта-функции в (8.57)]. При этом спектр рассеянных фотонов определяется распределением атомных электронов по импульсам, даваемым функцией $|R_{nl}(p)|^2$.

Сечение комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме обычно выражают через комптоновский профиль (КП) электронной подболочки. КП определяется по формуле

$$J_{nl}(Q) = \frac{1}{2\hbar^3} \int_Q^\infty |R_{nl}(p)|^2 p dp. \quad (8.58)$$

С учетом данного определения динамический форм-фактор электронной подболочки в рамках импульсного приближения (8.57) может быть выражен через КП следующим образом:

$$S_{nl}^{1A}(q) = \frac{m}{|q|} J_{nl}\left(Q = \frac{m|\Delta\omega| - \hbar q^2/2}{|q|}\right). \quad (8.59)$$

Отметим, что КП удовлетворяет нормировочному условию:

$$2 \int_0^\infty J_{nl}(Q) dQ = 1. \quad (8.60)$$

Поскольку комптоновское рассеяние является некогерентным процессом, атомный КП равен сумме КП всех электронных подболочек.

Используя связь (8.46) и формулу (8.59), для сечения комптоновского рассеяния рентгеновских лучей на атоме находим

$$\frac{d\sigma^{\text{IA}}}{d\Omega' d(\Delta\omega)} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{\text{Th}} \left(\frac{\omega}{\omega'}\right) \frac{m}{q} J(Q), \quad (8.61)$$

где

$$Q = \frac{m|\Delta\omega| - \hbar q^2/2}{|q|}.$$

Таким образом, выражение (8.61) совместно с формулой (4.3) для $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'}\right)^{\text{Th}}$ дает частотно-угловое распределение рентгеновского излучения, рассеянного атомом, в рамках высокочастотного и импульсного приближений. Видно, что частотное распределение для заданного угла рассеяния определяется комптоновским профилем атома (8.58), который в свою очередь зависит от волновых функций атомных электронов $R_{n_l}(r)$. Соответствующая зависимость от частоты представляет собой колоколообразную кривую, ширина которой определяется шириной распределения атомной волновой функции по импульсам. Приведем выражение для КП основного состояния водородоподобного иона:

$$J_{1s}^{\text{H}}(Q) = \frac{8p_{\text{H}}^5}{3\pi(p_{\text{H}}^2 + Q^2)^3}, \quad (8.62)$$

где p_{H} — характерный импульс водородоподобного иона,

$$p_{\text{H}} = \frac{Zme^2}{\hbar}.$$

Подставляя (8.62) в (8.61), находим частотную функцию распределения рентгеновского излучения в рамках ИП для фиксированного угла рассеяния на водородоподобном ионе в $1s$ -состоянии:

$$\frac{d\sigma_{1s}^{\text{H}}}{d\Delta\omega} = \sigma_{1s}(q) \frac{q^6 p_{\text{H}}^6}{\left[q^2 p_{\text{H}}^2 + (m|\Delta\omega| - \hbar q^2/2)^2\right]^3}, \quad (8.63)$$

где $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ — модуль изменения волнового вектора фотона при рассеянии. Из данной формулы следует, что центральная частота рассеянного излучения определяется равенством

$$m(\omega - \omega') = \frac{\hbar q^2}{2}.$$

Это равенство представляет собой закон сохранения энергии-импульса для процесса рассеяния излучения на свободном покоящемся электроне. Ширина частотного распределения (8.63) пропорциональна параметру qp_H/m , что соответствует доплеровскому уширению спектра излучения, рассеянного на электроне, движущемся со скоростью

$$v_H = \frac{p_H}{m} = \frac{Ze^2}{\hbar}.$$

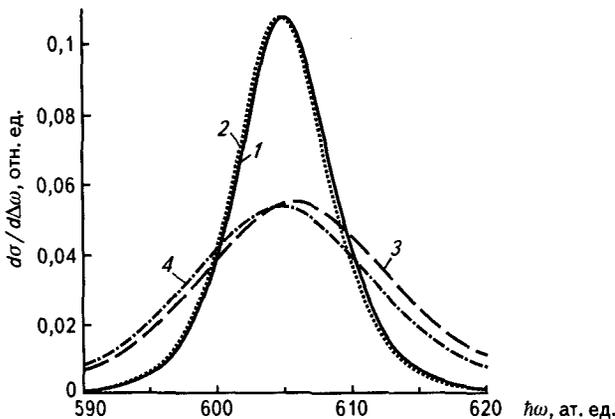


Рис. 8.3. Спектральное сечение комptonовского рассеяния рентгеновских лучей ($\hbar\omega = 17\,400$ эВ, угол рассеяния $\vartheta = 133,75^\circ$) на водородоподобном ионе в основном состоянии, рассчитанное в высокочастотном приближении с использованием точных волновых функций (кривые 1, 3) и в рамках импульсного приближения (кривые 2, 4) для различных зарядов ядра иона:

кривые 1, 2 — $Z = 1$; кривые 3, 4 — $Z = 2$

На рис. 8.3 представлено спектральное сечение комptonовского рассеяния (в относительных единицах) на водородоподобном ионе в



1s-состоянии, рассчитанное в высокочастотном приближении с использованием точных волновых функций (кривые 1, 3) и в рамках импульсного приближения (кривые 2, 4) по формулам (8.61) и (8.62). Рассмотрены два значения заряда ядра иона: $Z = 1$ (кривые 1, 2) и $Z = 2$ (кривые 3, 4). Энергия падающего фотона равна $\hbar\omega = 17\,400$ эВ (639,7 ат. ед.) (что соответствует линии K_{α_1} в атоме молибдена), угол рассеяния излучения $\vartheta = 133,75^\circ$. Как видно из данного рисунка, максимум спектрального сечения приходится на энергию рассеянного фотона $\hbar\omega = 605$ ат. ед. (16 456 эВ), что соответствует энергии отдачи $E_R = \hbar|\Delta\omega| = 944$ эВ.

Заметим, что энергия отдачи при рассеянии на свободном покоящемся электроны для заданных значений параметров равна 949 эВ, что находится в хорошем соответствии с вышеприведенным значением E_R в максимуме спектрального сечения. Подчеркнем, что в случае свободного электрона существует однозначное соответствие между углом рассеяния и частотой рассеянного фотона. Поэтому спектральное сечение представляет собой дельта-функцию частотной отстройки $\omega - \omega' - E_R/\hbar$. Связь электрона с ядром приводит к возникновению конечной спектральной ширины $\delta\omega$ частотного распределения рассеянных фотонов при заданном угле рассеяния ϑ . Естественно, чем сильнее связь с ядром, тем больше величина параметра $\delta\omega$. Это следует также из рис. 8.3: для больших значений заряда ширина частотной зависимости больше. Кроме того, из данного рисунка вытекает, что точность ИП уменьшается с ростом энергии связи E_B ($E_B = Z^2 R_y$ в случае водородоподобного иона) при фиксированной энергии отдачи E_R . Таким образом, критерием применимости ИП может служить величина отношения $\xi = E_B/E_R$, с уменьшением параметра ξ точность ИП возрастает. Другим следствием результатов, представленных на рис. 8.3, является наличие асимметрии частотного распределения рассеянных фотонов, рассчитанного с помощью точных волновых функций (кривые 1, 3). В высокочастотном крыле линии интенсивность рассеянного излучения падает медленнее, чем в низкочастотном крыле, причем эта асимметрия растет с ростом энергии связи E_B . В то же время расчет в рамках ИП дает симметричный (в данном случае лоренцевский) контур. Заметим, что обсуждаемая асимметрия может быть до некоторой степени учтена и в рамках импульсного приближения, если в правой части равенства (8.51) учесть следующие члены разложения.

8.4. РАССЕЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЛАЗМЕ

Перейдем теперь к рассмотрению рассеяния электромагнитного излучения на электронах в плазме. Сечение рассеяния излучения на ионах пренебрежимо мало из-за большой массы иона. Плазменные электроны в отличие от атомных совершают инфинитное движение, т. е. они делокализованы во всем объеме, занимаемом плазмой. Поэтому, строго говоря, для плазменных электронов не выполняется условие дипольного приближения (8.8), так как радиус области их локализации очень велик. Поскольку плазменные электроны являются квазисвободными и потенциал их ионизации I_p равен нулю, для них автоматически выполняется условие высокочастотного приближения и можно использовать выражение для сечения рассеяния типа формулы (8.22).

Прилагательное «квазисвободные» не случайно употреблено по отношению к плазменным электронам. Приставка «квази» отражает тот факт, что плазменные электроны взаимодействуют с другими частицами и коллективными возбуждениями плазмы. Это взаимодействие может проявиться в процессе рассеяния электромагнитных волн на плазменных электронах вблизи частот коллективных плазменных возбуждений. Так, например, избыток импульса, передаваемый от фотона при рассеянии, может поглотиться самим плазменным электроном, а может быть передан другой частице или квазичастице. В зависимости от этого частота рассеянного излучения изменяется на ту или другую величину, так что, регистрируя спектр рассеянных фотонов, можно получить информацию о свойствах плазмы.

Общее выражение для сечения рассеяния излучения в плазме

Принимая во внимание вышесказанное, обобщим сечение рассеяния (8.22) на учет возможного изменения состояния плазменного электрона в ходе рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{fi}^{(\text{plas})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{d\Omega' d\omega'} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \delta(\Delta\omega + \omega_{fi}) r_e^2 |n_{fi}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 dV, \quad (8.64)$$

где $\Delta\omega = \omega - \omega'$ — изменение частоты излучения; dV — элемент объема, в котором расположены рассеивающие плазменные элект-



роны (объем взаимодействия). Приведенное выражение описывает рассеяние излучения с переходом плазменного электрона из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ (для обозначения электронных состояний здесь также использованы дираковские кет-векторы). Формула (8.64) дает сечение рассеяния фотона в интервале частот $\omega' + d\omega'$, т. е. оно дифференциально не только по углу, но и по частоте рассеянного излучения. Дельта-функция в правой части равенства (8.64) выражает закон сохранения энергии в процессе рассеяния.

Поскольку на эксперименте начальное и конечное состояния плазменного электрона не фиксированы, формулу (8.64) нужно просуммировать по конечным состояниям и усреднить по начальным. В результате приходим к следующему результату:

$$\frac{d\sigma_{\Sigma}^{(\text{plas})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{d\Omega' d\omega'} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) dV, \quad (8.65)$$

где введена важная величина $S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)$, которая называется электронным динамическим форм-фактором (ДФФ) плазмы, или функцией спектральной плотности. ДФФ отражает влияние плазменных характеристик на сечение рассеяния излучения. В общем случае определение ДФФ через Фурье-компоненту от временного коррелятора плазменной плотности имеет вид [3]

$$S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\Delta\omega t} \langle \hat{n}(\Delta\mathbf{k}, t) \hat{n}(-\Delta\mathbf{k}) \rangle, \quad (8.66)$$

где \hat{n} — оператор электронной плотности, угловые скобки включают в себя квантово-механическое и статистическое усреднения. Равенство (8.66) можно получить из формулы

$$S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = \sum_{f,i} w(i) \delta(\Delta\omega + \omega_{fi}) |n_{fi}(\Delta\mathbf{k})|^2, \quad (8.67)$$

в которой в явном виде проводится усреднение по начальным и суммирование по конечным состояниям плазменных электронов ($w(i)$ — вероятность нахождения плазменного электрона в i -м состоянии).

По своему физическому смыслу электронный ДФФ определяет вероятность поглощения плазмой четырехмерного волнового вектора энергии-импульса $\Delta k = (\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)$ через воздействие внешнего воз-

мушения на электронную компоненту. Подчеркнем, что в случае однородного распределения заряда в плазме эта вероятность равнялась бы нулю, так как тогда Фурье-образ электронной плотности сводится к дельта-функции $n(\Delta\mathbf{k}) \rightarrow \delta(\Delta\mathbf{k})$, т. е. $\Delta\mathbf{k} = 0$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Таким образом, к рассеянию излучения приводят именно флуктуации электронной плотности в плазме. Эти флуктуации могут быть связаны с различными причинами. Типичная причина флуктуации электронного заряда — дебаевская экранировка ионов плазменными электронами, когда электронная плотность увеличена вблизи расположения положительного иона. Другой тип флуктуации связан с коллективным возбуждением в плазме, например, плазмоном. Тогда флуктуация электронного заряда носит нестационарный характер: она осциллирует на плазменной частоте

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}},$$

где n_e — концентрация плазменных электронов. При рассеянии на такой нестационарной флуктуации изменяется спектр излучения. Таким образом, можно сделать вывод о том, что спектр рассеянного излучения отражает спектр флуктуаций электронной плотности в плазме, который дается ДФФ (8.66) и (8.67).

Для вычисления ДФФ можно воспользоваться формулой, связывающей ДФФ плазменной компоненты с функцией отклика плазмы на внешнее электромагнитное возмущение (фиктивный внешний потенциал). Это соотношение известно, как флуктуационно-диссипационная теорема [3]:

$$S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = \frac{\text{Im}\{F_{ee}(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)\}}{\pi e^2 [\exp(-\hbar\Delta\omega/T) - 1]}, \quad (8.68)$$

где $F_{ee}(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)$ — линейная функция отклика электронной компоненты на фиктивный внешний потенциал, действующий только на плазменные электроны; T — температура плазмы в энергетических единицах. Мнимая часть функции отклика, фигурирующая в (8.68), описывает диссипацию энергии в плазме, с чем связано название теоремы. Функция отклика выражается через диэлектрическую проницаемость плазмы, которая описывает распространение различных

электромагнитных возмущений в плазме. После ряда математических преобразований из равенства (8.68) получается следующий результат для динамического форм-фактора электронной компоненты плазмы:

$$S(\Delta k) = \left| \frac{\varepsilon^{(i)}}{\varepsilon'} \right|^2 |\delta n_e|^2 + Z_i \left| \frac{1 - \varepsilon^{(e)}}{\varepsilon'} \right|^2 |\delta n_i|^2, \quad (8.69)$$

где $|\delta n_{e,i}|^2$ — Фурье-образы квадратов тепловых флуктуаций электронной и ионной компоненты плазмы,

$$|\delta n_{e,i}|^2 = \frac{n_{e,i}}{\sqrt{2\pi} v_{Te,i} |\Delta k|} \exp\left(-\frac{\Delta\omega^2}{2\Delta k^2 v_{Te,i}^2}\right); \quad (8.70)$$

$\varepsilon' = \varepsilon'(\Delta k)$ — продольная часть диэлектрической проницаемости плазмы, которая описывает распространение продольных плазменных волн, соответствующих флуктуациям плотности; v_T — тепловая скорость частиц плазмы. Индексы (i) и (e) в обозначениях диэлектрической проницаемости и тепловой скорости указывают на принадлежность этих величин к ионной или электронной компоненте плазмы.

В дальнейшем потребуются выражения для продольной части электронной и ионной диэлектрической проницаемости плазмы, фигурирующие в правой части равенства (8.69). Их явный вид зависит от соотношения между пространственной и временной составляющей четырехвектора $\Delta k = (\Delta k, \Delta\omega)$, т. е. между пространственными и временными характеристиками электронной и ионной компоненты плазмы. Так, электронная часть функции $\varepsilon^{(e)}$, для которой справедливо неравенство $|\Delta\omega| < v_{Te} |\Delta k|$, описывает эффект экранировки заряда в плазме. Соответствующее выражение имеет вид:

$$\varepsilon^{(e)}(\Delta k) \cong 1 + \frac{1}{d_e^2 |\Delta k|^2}, \quad (8.71)$$

где d_e — дебаевский экранировочный радиус электронной компоненты. Напротив, для ионной составляющей продольной диэлектрической проницаемости характерно противоположное неравенство

$|\Delta\omega| < v_{Ti}|\Delta k|$ (из-за малой скорости ионов). Это приводит к частотно-зависимому соотношению:

$$\varepsilon^{(i)}(\Delta\omega) \cong 1 - \frac{\omega_{pi}^2}{\Delta\omega^2}, \quad (8.72)$$

где ω_{pi} — ионная плазменная частота,

$$\omega_{pi} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_i}{m_i}}.$$

Рассеяние излучения на плазменном электроне

Подставляя ДФФ (8.69) и (8.70) в выражение для сечения рассеяния излучения в плазме (8.65), можно получить это сечение в виде суммы двух слагаемых. Первое из них связано с первым слагаемым в фигурных скобках равенства (8.69) для ДФФ. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma_e^{(\text{plas})}(k, k')}{d\Omega' d\omega'} \cong \\ & \cong \frac{\exp\left(-\frac{\Delta\omega^2}{2\Delta k^2 v_{Te}^2}\right)}{\sqrt{2\pi} v_{Te} |\Delta k|} \left[\frac{\Delta k^2 d_e^2}{1 + \Delta k^2 d_e^2} \right]^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 n_e dV. \end{aligned} \quad (8.73)$$

Вышеприведенное сечение связано с рассеянием излучения на электронном заряде, экранирующем флуктуацию электронной плотности. Флуктуация электронной плотности описывается множителем в первой строке равенства (8.73), на что указывает присутствие в нем тепловой скорости плазменных электронов. За экранировку ответственен фактор в квадратных скобках. Он мал при малых переданных волновых векторах $|\Delta k| < d_e^{-1}$ и стремится к единице в противоположном пределе. Таким образом, рассеяние на флуктуациях электронной плотности подавлено на малых углах рассеяния

$$\theta < 2 \arcsin \left(\frac{\lambda}{4\pi d_e} \right).$$

Это неравенство справедливо для достаточно коротких длин волн $\lambda < 4\pi d_e$.

Как видно из частотной зависимости в формуле (8.73), ширина спектра рассеянного на флуктуациях электронной плотности излучения определяется тепловой скоростью плазменных электронов, которая в свою очередь является мерой плазменной температуры. Чем выше температура, тем шире спектр рассеянных фотонов. Величина сечения пропорциональна концентрации плазменных электронов. Поэтому, регистрируя интенсивность и спектр рассеянного излучения, можно судить о таких важных характеристиках плазмы, как температура и электронная концентрация.

Процесс, описываемый сечением (8.73), аналогичен комптоновскому рассеянию, поскольку избыток импульса передается плазменному электрону, уносящему с собой значительную энергию отдачи, так же как в случае эффекта Комптона на атоме. Можно сказать, что в случае, когда изменение волнового вектора больше обратной величины дебаевского радиуса, фотон рассеивается на каждом плазменном электроне «в отдельности», и коллективными плазменными эффектами можно пренебречь. Комptonовское рассеяние излучения в плазме изображено на рис. 8.4, на котором представлен импульс отдачи плазменного электрона

$$p_e = \frac{\Delta k}{\hbar}.$$

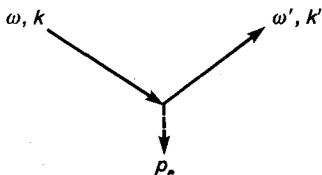


Рис. 8.4. Рассеяние излучения на плазменном электроне

Величина сечения рассеяния излучения в пересчете на один электрон пропорциональна квадрату классического радиуса электрона $r_e^2 \cong 7,84 \cdot 10^{-25} \text{ см}^2$, т. е. является очень малой величиной. Напомним в этой связи, что атомная единица сечения, определяющая, например, сечение рассеяния электронов на атомах, равна $2,8 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$. Поэтому возможность исследования плазменных характеристик с помощью рассеяния излучения возникла после появления лазерных источников излучения, обладающих высокой спектральной яркостью.

Переходное рассеяние излучения в плазме

Сечение рассеяния излучения на электронном заряде, экранирующем флуктуации ионной плотности, имеет вид:

$$\frac{d\sigma_i^{(\text{plas})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{d\Omega' d\omega'} \cong \frac{\exp\left(-\frac{\Delta\omega^2}{2\Delta k^2 v_{Ti}^2}\right)}{\sqrt{2\pi} v_{Ti} |\Delta k|} \left[\frac{Z_i}{1 + \Delta k^2 d_e^2} \right]^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 n_i dV, \quad (8.74)$$

где Z_i — зарядовое число плазменного иона; $n_i = n_e/Z_i$ — концентрация ионов в электронейтральной плазме. Здесь первый множитель описывает ионные флуктуации, а выражение в квадратных скобках представляет собой электронный заряд дебаевской сферы, рассеивающий излучение с заданным значением Δk . В случае $|\Delta k| < d_e^{-1}$ сечение рассеяния пропорционально квадрату зарядового числа иона, в чем проявляется когерентный характер процесса по вкладу электронов внутри дебаевской сферы. При выполнении противоположного неравенства когерентность нарушается, и сечение рассеяния убывает как $\Delta k^{-4} d_e^{-4}$. Для достаточно больших длин волн рассеивающегося излучения $\lambda > d_e$ когерентность имеет место для всех углов рассеяния. В противоположном пределе коротковолнового излучения сечение рассеяния максимально в диапазоне

$$\theta < 2 \arcsin\left(\frac{\lambda}{4\pi d_e}\right)$$

и резко падает с ростом угла рассеяния.

Рассеяние излучения на дебаевской сфере (8.74) называется *переходным рассеянием* [4]. Этот процесс схематически изображен на рис. 8.5, на котором указан импульс отдачи иона $p_i = \hbar|\Delta k|$, возникающий в ходе рассеяния.

Переходное рассеяние сопровождается передачей избытка импульса тяжелому иону, так что изменение энергии фотона невелико.

Последнее обстоятельство можно продемонстрировать с помощью предельного перехода

$$\frac{\exp\left(-\frac{\Delta\omega^2}{2\Delta k^2 v_{Ti}^2}\right)}{\sqrt{2\pi} v_{Ti} |\Delta k|} \rightarrow \delta(\Delta\omega), \quad (8.75)$$

справедливого, если $|\Delta\omega| \gg v_{Ti} |\Delta k|$. Из соотношения (8.75) следует, что в данном случае рассеяние происходит практически без изменения частоты излучения $\omega' \cong \omega$. Таким образом, рассеяние излучения на дебаевских «шубах» электронного заряда вокруг иона в плазме (переходное рассеяние) является аналогом рэлеевского излучения на атоме, когда частота излучения не изменяется.

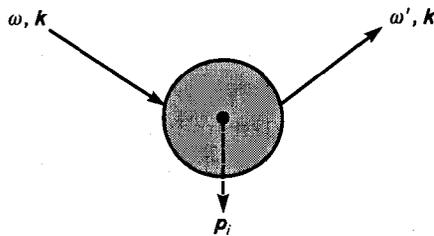


Рис. 8.5. Переходное рассеяние излучения на дебаевской сфере в плазме

Рассеяние излучения на плазмоне

Выше рассматривалось рассеяние, при котором избыток импульса фотона $\Delta p_{ph} = \hbar\Delta k$ передавался индивидуальным возбуждениям плазмы: электронам и ионам. Возможен также процесс с участием коллективного плазменного возбуждения, когда избыток импульса передается *плазмону*, представляющему собой связанное колебание электронного заряда и продольного электрического поля. Этот процесс с испусканием плазмона схематически изображен на рис. 8.6.

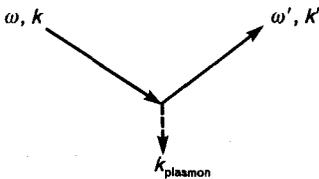


Рис. 8.6. Рассеяние излучения на плазмоне

Плазмон характеризуется соответствующим законом дисперсии. Напомним, что закон дисперсии описывает связь между частотой и

волновым вектором. Для коллективных возбуждений (квазичастиц) в плазме его можно получить из условия равенства нулю диэлектрической проницаемости среды, т. е. из условия распространения плазменных волн. В случае продольного колебания электрического поля (плазмона) закон дисперсии определяется уравнением:

$$\varepsilon^{(l)}(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (8.76)$$

где $\varepsilon^{(l)}(\mathbf{k}, \omega)$ — продольная часть диэлектрической проницаемости среды. Из (8.76) с учетом явного вида диэлектрической проницаемости плазмы для $|\mathbf{k}| < d_e^{-1}$ (8.71) вытекает равенство

$$\omega_{pl}(\mathbf{k}) \equiv \omega_{pe} \sqrt{1 + 3\mathbf{k}^2 d_e^2} \approx \omega_{pe}, \quad (8.77)$$

представляющее собой закон дисперсии для плазмона. Он отвечает распространению плазмонов на плазменной частоте ω_{pe} . В случае достаточно больших волновых векторов $|\mathbf{k}| > d_e^{-1}$ плазмон не является хорошо определенным возбуждением, поскольку исчезает за времена порядка периода плазмонного колебания.

При выполнении условия плазмонного резонанса (8.76) в выражении для электронного ДФФ (8.69) появляется сингулярность, отвечающая испусканию/поглощению плазмона. Эта сингулярность обусловлена наличием функции $\varepsilon^{(l)}(\mathbf{k}, \omega)$ в знаменателе формулы (8.69). Она в силу наличия мнимой части у диэлектрической проницаемости сводится к дельта-функции вида $\delta[\Delta\omega \pm \omega_{pl}(\Delta\mathbf{k})]$, описывающей закон сохранения энергии (знак «+» соответствует испусканию плазмона, «-» — поглощению). Опуская математические детали, выпишем выражение для электронного ДФФ с передачей энергии-импульса испущенному плазмону

$$S_{pl}(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = (N_{pl}(\Delta\mathbf{k}) + 1) \frac{\hbar\omega_{pl}(\Delta\mathbf{k})\Delta\mathbf{k}^2}{8\pi e^2} \delta[\Delta\omega + \omega_{pl}(\Delta\mathbf{k})] \Theta(1 - |\Delta\mathbf{k}|d_e), \quad (8.78)$$

где $\Theta(x)$ — ступенчатая тэта-функция Хэвисайда; $N_{pl}(\Delta\mathbf{k})$ — число плазмонов при заданной температуре в состоянии термодинамического равновесия,

$$N_{pl}(\Delta\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp(\omega_{pl}(\Delta\mathbf{k})/T) - 1}. \quad (8.79)$$



Подставляя (8.78) в формулу (8.65), получаем после интегрирования по частоте рассеянного фотона сечение рассеяния излучения с генерацией плазмона

$$\frac{d\sigma_{pl}^{(plas)}}{d\Omega'} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} r_e^2 \Theta(1 - |\Delta k| d_e) (N_{pl}(\Delta k) + 1) \frac{\hbar \omega_{pl}(\Delta k) \Delta k^2}{8\pi e^2} dV. \quad (8.80)$$

Частота рассеянного излучения равна $\omega' = \omega - \omega_{pl}(\Delta k)$.

Для сечения рассеяния с поглощением плазмона имеет место выражение, аналогичное (8.80) с точностью до замены $N_{pl}(\Delta k) + 1 \rightarrow N_{pl}(\Delta k)$ и $\omega' = \omega + \omega_{pl}(\Delta k)$. Из проведенного рассмотрения следует, что, регистрируя зависимость частоты рассеянного фотона от угла рассеяния, можно экспериментально установить закон дисперсии для плазмонов.

Аналогичные выражения справедливы для сечений рассеяния излучения на коллективных плазменных возбуждениях других типов, например ионно-звуковых волнах и т. д.

Регистрируя спектр рассеянного плазмой излучения, можно изучать различного рода квазичастицы в плазме. Ширина спектра излучения, рассеянного на каком-либо коллективном возбуждении, определяет константу затухания и соответственно время жизни расматриваемой квазичастицы.

Рассеяние на коллективных возбуждениях в плазме, сопровождающееся изменением частоты излучения, является аналогом комбинационного рассеяния излучения на атомах и молекулах.

8.5. РАССЕЯНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ НА НАНОЧАСТИЦАХ

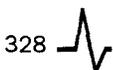
Цвет наиболее сильных красящих веществ — органических красителей — определяется, как правило, поглощением излучения молекулами красителя. При взаимодействии излучения с металлическими наночастицами ситуация иная. Для малых радиусов наносферы $r_s < 15\text{--}35$ нм доминирует поглощение, для больших

радиусов определяющую роль начинает играть рассеяние излучения. Суммарное влияние поглощения и рассеяния на прохождение светового луча через вещество описывается сечением экстинкции $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{scat}} + \sigma_{\text{abs}}$. Величина $\sigma_{\text{ext}} I_0$ представляет собой мощность, удаляемую из падающего на наночастицу светового луча интенсивности I_0 , за счет поглощения и рассеяния. Отношение сечения рассеяния к сечению экстинкции называется *квантовым выходом* $\eta = \sigma_{\text{scat}} / \sigma_{\text{ext}}$. Квантовый выход характеризует относительную величину удаляемой из светового луча мощности, которая идет на рассеяние излучения, т. е. может быть зарегистрирована фотоприемником. Из вышесказанного следует, что квантовый выход возрастает с ростом размера наночастицы, но, как будет видно из дальнейшего рассмотрения, другая важная характеристика — добротность резонансного рассеяния — с ростом радиуса уменьшается.

Важной специфической чертой фотопроцессов с участием металлических наночастиц является отсутствие люминесценции при воздействии на них излучения, характерной для мишеней, обладающих сильными оптическими переходами в дискретном спектре (см. гл. 6). В результате излучение металлических наночастиц полностью обусловлено рассеянием на них электромагнитных волн. Это приводит, в частности, к узкому спектру излучения при возбуждении металлической наносферы лазером с узкой спектральной линией.

Сферические наночастицы из благородных металлов (золота и серебра) находят широкое применение в различных областях исследований и технологий. Так, в частности, золотые наносферы активно используются как наномаркеры в медицине и биологии. Кроме того, весьма перспективно использование металлических наночастиц в различного рода сенсорах.

Достоинство сферической формы наночастицы с фундаментальной точки зрения заключается, прежде всего, в том, что отсутствует зависимость ее оптических свойств (сечения поглощения и рассеяния) от формы и остается только зависимость от размера. Это позволяет управлять характеристиками электромагнитного отклика наносферы, изменяя ее радиус. Кроме того, сечение рассеяния и поглощения излучения на металлических сферах могут быть описаны в рамках относительно простого аналитического подхода.



Простейшее рассмотрение

Выражение (8.13) для сечения рэлеевского рассеяния на атоме может быть использовано для описания рассеяния излучения на сферических наночастицах. В этом случае формула (8.13) может быть переписана в виде

$$\sigma_s^{\text{scat}}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left| \frac{\omega^2}{c^2} \beta_s(\omega) \right|^2, \quad (8.81)$$

где $\beta_s(\omega)$ — динамическая поляризуемость наносферы. Функция $\beta_s(\omega)$ в рамках теории Ми [5] дается формулами (5.55)—(5.61), если только размер наносферы существенно превышает межатомное расстояние ее материала, когда справедливо описание электромагнитного взаимодействия с помощью диэлектрической проницаемости вещества. Если радиус наносферы существенно меньше длины волны рассеиваемого излучения $r_s \ll \lambda$, то можно пользоваться более простым выражением для динамической поляризуемости (5.66)

$$\beta_s(\omega) = r_s^3 \varepsilon_m \frac{\varepsilon_s(\omega) - \varepsilon_m}{\varepsilon_s(\omega) + 2\varepsilon_m}, \quad (8.82)$$

где $\varepsilon_s(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость материала сферы; ε_m — диэлектрическая проницаемость матрицы, т. е. среды, в которой находится наносфера.

Обращение в ноль реальной части знаменателя в равенстве (8.82) физически отвечает возбуждению плазмона на поверхности наносферы (поверхностный плазмон). Об этом уже говорилось в гл. 5 настоящей книги при рассмотрении динамической поляризуемости сферических наночастиц [см. формулу (5.67)].

В случае металлической сферы для вычисления диэлектрической проницаемости ее материала может быть использована модель Друде (приближение квазисвободных электронов), с поправкой на вклад связанных электронов. Соответствующая формула имеет вид

$$\varepsilon_s(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} + i \frac{\gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}, \quad (8.83)$$

где γ — константа релаксации; ω_p , n — концентрация электронов проводимости,

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m^*}};$$

m^* — эффективная масса электрона в зоне проводимости; ϵ_∞ — слагаемое, описывающее вклад связанных электронов в диэлектрическую проницаемость металла. В случае учета только электронов проводимости $\epsilon_\infty = 1$. Константа релаксации связана со временем релаксации электрона τ : $\gamma \sim 1/\tau$. Время релаксации определяет проводимость металла в постоянном электрическом поле

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*}$$

и может быть определено по этой формуле. Использование эффективной массы m^* вместо массы свободного электрона m_e позволяет в первом приближении учесть влияние кристаллической решетки металла на движение электрона проводимости.

Сравнение с экспериментальными данными показывает, что формула (8.83) хорошо описывает оптические свойства металла в диапазоне энергий фотонов $\hbar\omega \leq 2-3$ эВ. Для больших энергий заметную роль начинают играть межзонные переходы электронов в металле, что особенно сильно сказывается на величине мнимой части диэлектрической проницаемости, которая возрастает примерно на порядок величины. Тем не менее для получения аналитического результата удобно пользоваться равенством (8.83), подразумевая при этом, что константа релаксации $\gamma = \gamma(\omega)$ возрастает с увеличением частоты.

Параметры диэлектрической проницаемости в модели Друде для трех металлов приведены в табл. 8.1.

Из данной таблицы следует, что константа релаксации электрона в объемном металлическом образце много меньше соответствующей плазменной частоты $\gamma \ll \omega_p$. Тем не менее учет мнимой части в выражении (8.83) необходим, чтобы избежать сингулярности при вычислении динамической поляризуемости наносферы (8.82). В дальнейшем пренебрегают зависимостью диэлектрической проницаемости матрицы от частоты, что справедливо для не слишком высоких частот излучения.



Таблица 8.1. Параметры Друде для некоторых металлов (из диссертации [6])

Металл	Au	Ag	Cu
$n, \text{см}^{-3}$	$5,90 \cdot 10^{22}$	$5,76 \cdot 10^{22}$	$8,45 \cdot 10^{22}$
ε_∞	9,84	3,7	—
m^*/m	0,99	0,96	1,49
$\hbar\omega_p, \text{эВ}$	9,1	9,1	8,8
$\tau, \text{фс}$	29	40	40
$\hbar\gamma, \text{эВ}$	0,067	0,018	0,018

В случае металлических наночастиц малого радиуса ($r_s \leq 30$ нм) необходимо учитывать рассеяние электронов проводимости на поверхности сферы, что приводит к «поверхностной» добавке к константе релаксации γ_{surf} , феноменологическое выражение для которой имеет вид:

$$\gamma_{\text{surf}} = \frac{1}{\tau_{\text{surf}}} = A \frac{v_F}{r_s}, \quad (8.84)$$

где v_F — скорость Ферми ($1,4 \cdot 10^8$ см/с для золота и серебра); A — подгоночный параметр, величина которого для серебра колеблется в пределах от 0,1 до 0,7 в зависимости от химического окружения наночастицы.

Подставляя (8.82) и (8.83) в (8.81) и пренебрегая в нерезонансных комбинациях константой затухания, находим выражение для сечения рассеяния излучения на металлической наносфере в дипольном приближении в спектральной области вблизи плазмонного резонанса:

$$\sigma_s^{\text{scat}}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_m}{c^2} r_s^3 \right)^2 \frac{\left[(\varepsilon_\infty - \varepsilon_m) (\omega/\omega_p)^2 - 1 \right]^2}{\left[(\varepsilon_\infty + 2\varepsilon_m) (\omega/\omega_p)^2 + (\gamma_{\text{tot}}/\omega)^2 - 1 \right]^2 + (\gamma_{\text{tot}}/\omega)^2}, \quad (8.85)$$

где $\gamma_{\text{tot}} = \gamma(\omega) + \gamma_{\text{surf}} + \gamma_{\text{rad}}$ — суммарная константа релаксации, учитывающая рассеяние электронов на поверхности сферы (8.84) и радиационное затухание γ_{rad} , обусловленное излучением электромагнитных волн поверхностным плазмоном наночастицы.

Отметим, что если параметр γ_{surf} уменьшается с ростом размера наночастицы согласно (8.84), то константа радиационного затухания γ_{rad} , как показывает эксперимент, растет пропорционально r_s^3 .

Из формулы (8.85) следует, что максимум сечения рассеяния излучения при возбуждении поверхностного плазмона достигается на резонансной частоте [ср. с (5.69)]

$$\omega_{\text{res}} = \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty + 2\epsilon_m} - \gamma_{\text{tot}}^2}. \quad (8.86)$$

В приближении квазисвободных электронов (модель Друде); когда $\epsilon_\infty = 1$, для наносферы в вакууме $\epsilon_m = 1$ формула (8.86) без учета затухания дает

$$\omega_{\text{res}} = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}},$$

т. е. частота плазмона на сферической поверхности в $\sqrt{3}$ раз меньше частоты объемного плазмона (без учета дисперсии). Заметим, что частота плазмона на плоской поверхности металл/вакуум равна

$$\omega_{\text{res}} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}.$$

Существенно, что резонансная частота рассеяния уменьшается с ростом константы затухания γ_{tot} и зависит от диэлектрической проницаемости матрицы ϵ_m . Последнее обстоятельство используется в практическом использовании металлических наносфер как сенсоров для мониторинга окружающей среды.

Спектральная ширина максимума сечения рассеяния (8.85) совпадает с суммарной константой релаксации:

$$\Delta\omega_{\text{scat}} = \gamma_{\text{tot}} = \gamma(\omega) + A \frac{v_F}{r_s} + \gamma_{\text{rad}}. \quad (8.87)$$

Поскольку согласно экспериментальным данным $\gamma_{\text{rad}} \sim r_s^3$, а $\gamma_{\text{surf}} \sim r_s^{-1}$, то, начиная с некоторого радиуса наносферы, спектральная ширина максимума сечения рассеяния растет с увеличением радиуса наносферы. При этом, как следует из формулы (8.86), положение максимума сдвигается в область меньших частот.

Напомним, что спектральная ширина максимума связана со временем поперечной релаксации оптического возбуждения $\Delta\omega = 2/T_2$. В данном случае параметр T_2 описывает время дефазировки поверхностного плазмона, с возбуждением которого связано рассеяние и поглощение излучения на наносфере в рассматриваемом спектральном диапазоне вблизи резонансной частоты (8.86). Экспериментальная зависимость этого времени от диаметра серебряной сферы приведена в табл. 8.2.

Таблица 8.2. Время дефазировки T_2 поверхностного плазмона для серебряных наносфер различного диаметра [6]

d , нм	20	40	60	80
T_2 , фс	4,5	5,2	4,7	2,3

Из данной таблицы следует, что с ростом диаметра время дефазировки сначала возрастает, что обусловлено уменьшением влияния рассеяния электронов на поверхности сферы, а затем начинает уменьшаться из-за роста потерь энергии на излучение (радиационное затухание).

На резонансной частоте (8.86) в дипольном приближении сечение рассеяния излучения металлической наносферой (в пренебрежении членами $\sim \gamma_{\text{tot}}/\omega_p$) равно:

$$\sigma_s^{\text{scat}}(\omega_{\text{res}}) = \frac{24\pi\omega_p^4 r_s^6}{c^4} \left(\frac{\omega_p}{\gamma_{\text{tot}}(r_s)} \right)^2 \frac{\epsilon_m^4}{(\epsilon_\infty + 2\epsilon_m)^5}. \quad (8.88)$$

Отсюда следует сильное возрастание сечения в максимуме с увеличением радиуса наносферы до тех пор, пока этот рост не компенсируется ростом константы релаксации γ_{tot} , обусловленным радиационным затуханием поверхностного плазмона.

В рамках простейшего аналитического подхода для вычисления сечения поглощения излучения наносферой в дипольном приближении ($\lambda \gg r_s$) можно воспользоваться оптической теоремой:

$$\sigma_s^{\text{abs}}(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c} \text{Im} \{ \beta_s(\omega) \} \quad (8.89)$$

и выражением для динамической поляризуемости (8.82). В результате находим:

$$\begin{aligned} \sigma_s^{\text{abs}}(\omega) &\approx \\ &\approx \frac{12\pi\epsilon_m^2}{c} r_s^3 \frac{\gamma_{\text{tot}}(\omega/\omega_p)^2}{\left[(\epsilon_\infty + 2\epsilon_m)(\omega/\omega_p)^2 + (\gamma_{\text{tot}}/\omega)^2 - 1 \right]^2 + (\gamma_{\text{tot}}/\omega)^2}. \end{aligned} \quad (8.90)$$

Частота максимума сечения поглощения дается той же формулой (8.86), что и для сечения рассеяния. Как следует из равенства (8.90), сечение поглощения излучения наносферой в максимуме частотной зависимости равно

$$\sigma_s^{\text{abs}}(\omega_{\text{res}}) = \frac{12\pi\omega_p \epsilon_m^2}{c(\epsilon_\infty + 2\epsilon_m)^2} r_s^3 \frac{\omega_p}{\gamma_{\text{tot}}(r_s)}. \quad (8.91)$$

Отсюда, в частности, следует, что сечение поглощения в рассматриваемом приближении возрастает как куб радиуса наносферы и на резонансной частоте пропорционально отношению $\omega_p/\gamma_{\text{tot}}$ в отличие от резонансного сечения рассеяния (8.88). Отношение сечений рассеяния и поглощения излучения в максимуме частотной зависимости, вытекающее из формул (8.88) и (8.91), дается равенством:

$$\frac{\sigma_s^{\text{scat}}(\omega_{\text{res}})}{\sigma_s^{\text{abs}}(\omega_{\text{res}})} = 2 \left(\frac{r_s \omega_p}{c} \right)^3 \frac{\omega_p}{\gamma_{\text{tot}}} \frac{\epsilon_m^2}{(\epsilon_\infty + 2\epsilon_m)^3}. \quad (8.92)$$

Таким образом, рассеяние излучения на наносфере доминирует над поглощением для достаточно больших радиусов. Для параметров серебряной сферы граничный радиус, разделяющий области существенности рассеяния и поглощения, порядка 15 нм. При использовании равенства (8.92) необходимо учитывать, что полная

константа релаксации зависит от радиуса наночастицы, что ограничивает возрастание отношения сечений рассеяния и поглощения при увеличении радиуса.

Существенный недостаток описания рассеяния и поглощения излучения на наносферах с помощью формул (8.81), (8.82) и (8.89) заключается в том, что зависимость параметра релаксации γ_{tot} от радиуса наночастицы не возникает в рамках данного подхода естественным образом. Поэтому модификация спектра рассеяния и поглощения излучения с изменением размера металлической сферы может быть теоретически воспроизведена только после того, как функция $\gamma_{\text{tot}}(r_s)$ найдена из эксперимента. Последовательный подход, лишенный указанного недостатка, возможен в рамках теории Ми, затрагивавшейся в гл. 5 при описании динамической поляризуемости металлических наносфер.

Теория Ми рассеяния и поглощения излучения

Теория Ми рассеяния излучения на металлической сфере, находящейся в однородной среде, базируется на разложении электромагнитного поля по цилиндрическим гармоникам (в силу цилиндрической симметрии задачи) и «сшивке» тангенциальных компонент напряженности электрического и магнитного полей на границе сферы. Для того, чтобы удовлетворить этим граничным условиям, необходимо предположить, что помимо падающего на сферу поля и поля внутри сферы есть еще поле вторичной (рассеянной) волны. Вывод соответствующих формул весьма громоздок, он имеется в классических монографиях по оптике [5], и мы приведем здесь лишь окончательный результат.

Сечение рассеяния излучения на металлической сфере согласно теории Ми равно

$$\sigma_{\text{scat}}^{(\text{Mie})} = \frac{2\pi c^2}{\epsilon_m \omega^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left\{ |a_n(x, mx, m)|^2 + |b_n(x, mx, m)|^2 \right\}, \quad (8.93)$$

где a_n , b_n — коэффициенты Ми даются формулами (5.58)–(5.61), параметры x и m имеют вид:

• произведение волнового вектора излучения в матрице на радиус наносферы:

$$x = kr_s = \sqrt{\epsilon_m} \frac{\omega}{c} r_s; \quad (8.94)$$

• отношение показателей преломления материала наносферы и матрицы:

$$m = \sqrt{\frac{\epsilon_s(\omega)}{\epsilon_m}}. \quad (8.95)$$

Формула (8.93) в отличие от (8.81) учитывает вклад не только дипольного $n = 1$, но и слагаемых, отвечающих вкладу высших мультиполей $n > 1$ в сечение рассеяния, что существенно для коротких длин волн, когда не выполняется условие дипольного приближения $r_s \geq \lambda$.

Результаты расчета сечения рассеяния излучения на серебряных сферах различного размера в рамках теории Ми представлены на рис. 8.7 в спектральном диапазоне вблизи плазмонного резонанса (8.86).

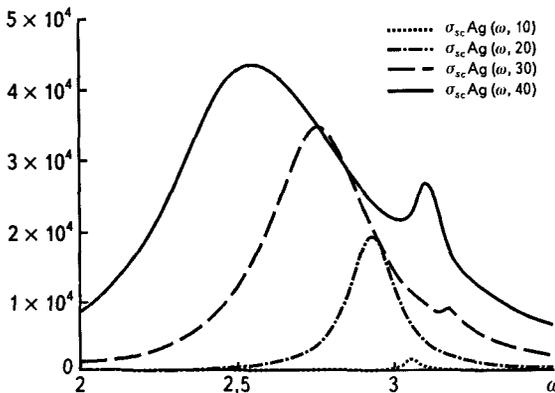


Рис. 8.7. Расчетное сечение рассеяния излучения на серебряных наносферах различного радиуса (10, 20, 30, 40 нм) вблизи плазмонного резонанса в среде с $\epsilon_m = 2,25$; по оси абсцисс отложена энергия фотона в эВ, по оси ординат — сечение процесса в нм^2

Из приведенного рисунка следует, что с увеличением размера металлической наносферы положение максимума сечения рассеяния сдвигается в длинноволновую область, а ширина спектрального максимума возрастает. Для радиусов 30 и 40 нм на кривых рис. 8.7 проявляется пик, связанный с квадрупольным резонансом при возбуждении поверхностного плазмона. Квадрупольное слагаемое отвечает $n = 2$ в сумме (8.93).

Экспериментальные и теоретические данные по рассеянию излучения на золотых наносферах различного диаметра в спектральной области вблизи плазмонного резонанса, полученные в диссертации [6], представлены на рис. 8.8. Расчет был проведен в рамках теории Ми с использованием объемного значения для диэлектрической проницаемости золота, определенного в эксперименте [7].

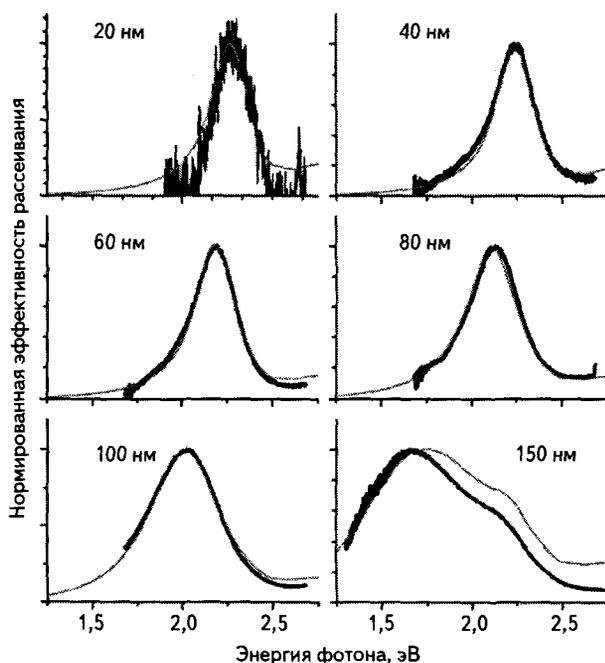


Рис. 8.8. Экспериментальные спектры рассеяния излучения на золотых наносферах различного диаметра (черные кривые) и расчет с помощью теории Ми (серые кривые). (Из диссертации [6])

Видно, что теоретические кривые хорошо воспроизводят не только положение максимума сечения и его спектральную ширину, но и точный ход кривой. Для диаметра наносферы 150 нм в высокоэнергетическом крыле появляется максимум, связанный с квадрупольным резонансом. Этот максимум слабее выражен, чем для случая серебряной сферы, что можно объяснить меньшим временем дефазировки поверхностного плазмона в золоте по сравнению с серебром. Хоро-

шее соответствие теории и эксперимента, следующее из графиков рис. 8.8, говорит о том, что использование в расчетах объемного значения диэлектрической проницаемости материала сферы (без учета локальных эффектов) является в данном случае оправданным.

Уменьшение частоты и увеличение спектральной ширины плазмонного резонанса с ростом размера наносферы приводит к уменьшению добротности Q (quality factor) плазмонного возбуждения, которая по определению равна

$$Q = \frac{\omega_{\text{res}}}{\Delta\omega}.$$

Для золотой наносферы величина добротности уменьшается с 8 до 2,5 при изменении радиуса от 30 до 80 нм. При этом энергия фотона в резонансе уменьшается с 2,2 до 1,7 эВ. При аналогичном изменении радиуса серебряной наносферы добротность поверхностного плазмона уменьшается с 11 до 4, а резонансная энергия — с 2,7 до 2,5 эВ.

Добротность плазмонного резонанса очень важна, поскольку она равна коэффициенту усиления локального поля, т. е. определяет значение напряженности электрического поля, связанного с поверхностным плазмоном, которое действует на частицы вблизи поверхности сферы. В результате такого усиления оказывается возможным наблюдать целый класс нелинейных оптических явлений, таких как комбинационное рассеяние, которые в противном случае практически ненаблюдаемы или для регистрации которых требуются сверхсильные электромагнитные поля.

Для сечения экстинкции излучения на металлической сфере теория Ми дает [5]:

$$\sigma_{\text{ext}}^{(\text{Mie})} = \frac{2\pi c^2}{\epsilon_m \omega^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re} \{a_n(x, mx, m) + b_n(x, mx, m)\}. \quad (8.96)$$

Выражения для коэффициентов разложения a_n , b_n приведены в гл. 5 [см. формулы (5.58)—(5.61)], параметры x и m даются равенствами (8.94) и (8.95). Напомним, что экстинкция описывает уменьшение интенсивности излучения в результате его поглощения и рассеяния на частицах вещества.

Как уже упоминалось в начале настоящего раздела, сечение поглощения излучения равно разности сечений экстинкции и рассея-

ния $\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{ext}} - \sigma_{\text{scat}}$. С помощью этого соотношения и выражений (8.93), (8.96) можно рассчитать сечение фотопоглощения на металлической сфере. Результат такого расчета для серебряных сфер различного радиуса, помещенных в среду с $\epsilon_m = 2,25$ (стекло), представлен на рис. 8.9.

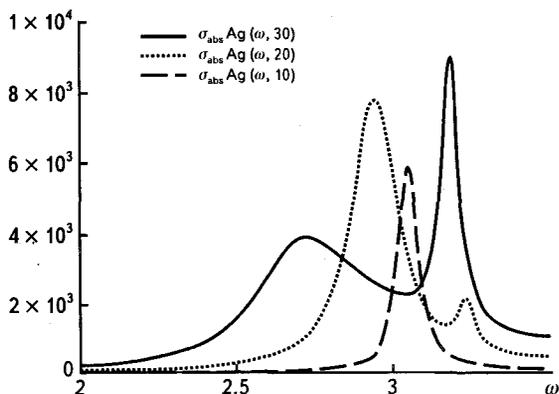


Рис. 8.9. Сечение поглощения излучения серебряными сферами различных радиусов (10, 20, 30 нм), рассчитанное в рамках теории Ми в области плазмонного резонанса. По оси абсцисс отложена энергия фотона в эВ, по оси ординат — сечение в нм²

Видно, что в отличие от сечения рассеяния сечение поглощения имеет существенно более сильный квадрупольный резонанс, который доминирует над дипольным, уже начиная с радиуса сферы 30 нм.

Численный анализ в рамках теории Ми показывает, что в случае серебряных наносфер сечение поглощения и рассеяния излучения в плазмонном максимуме сравниваются при радиусе 15 нм, для больших радиусов доминирует рассеяние над поглощением. Для золотых наносфер рассеяние сравнивается с поглощением при радиусе 37 нм, причем максимум спектрального сечения рассеяния в этом случае смещен относительно максимума поглощения в область меньших энергий фотонов примерно на 0,1 эВ. Отношение сечения рассеяния и поглощения связано с квантовым выходом рассеянного излучения, который является важным параметром, определяющим возможность практического использования наночастиц.

Важно подчеркнуть, что существенная зависимость спектров рассеяния и поглощения излучения металлическими наночастица-

ми вблизи плазмонного резонанса от радиуса сферы, которая следует из рис. 8.7 и 8.9, приводит к неоднородному уширению соответствующих спектров в случае ансамбля наночастиц с заметным разбросом радиуса. Это необходимо учитывать при анализе соответствующих экспериментальных данных.

Несмотря на хорошее соответствие теоретических и экспериментальных данных, следующее из рис. 8.8, необходимо помнить, что теория Ми имеет, естественно, свою область применимости. Это связано в первую очередь с феноменологическим описанием материала наночастицы с помощью диэлектрической проницаемости. Такой подход справедлив для достаточно больших размеров наночастицы и длины волны излучения, когда «работает» представление о веществе как о сплошной среде. В случае наночастиц малого размера существенную роль начинают играть локальные эффекты, которые не учитываются при использовании объемной диэлектрической проницаемости металла. Кроме того, теория Ми предполагает наличие резкой границы у металлической сферы, что также является приближением.

Практическое использование рассеяния излучения на наносферах

Среди областей практического применения металлических наночастиц следует отметить в первую очередь их использование для оптического детектирования биологических объектов и для исследования биохимических процессов. Наиболее важным преимуществом данного метода по сравнению с традиционным радиоизотопным маркированием является мгновенный отклик и простота реализации.

Физической основой использования металлических наночастиц в качестве сенсоров является зависимость частоты плазмонного резонанса в спектре рассеянного излучения от диэлектрической проницаемости окружающей среды (матрицы), что описывается формулой (8.86). Следует подчеркнуть, что рассеянный спектр зависит от *локальной* величины диэлектрической проницаемости матрицы. Это существенно повышает разрешающую способность рассматриваемого подхода по сравнению с другими оптическими методами. Как отмечается в диссертации [6], сдвиг плазмонного резонанса при рассеянии излучения на металлической наночастице определяется локальной концентрацией частиц окружающей среды в объеме порядка 10^{-16} см³. Число молекул в таком объеме, которые вызывают спектральный сдвиг, очень мало (порядка нескольких тысяч).

Пример влияния матрицы на экспериментальный спектр рассеянного серебряной наносферой излучения представлен на рис. 8.10. Диэлектрическая проницаемость водной матрицы изменялась за счет растворения в ней сахарозы — вещества с большим коэффициентом преломления, чем вода.

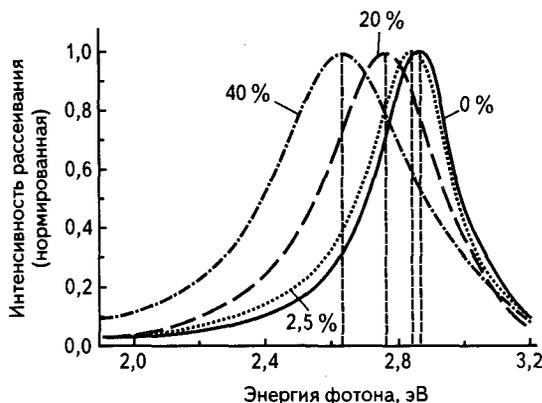


Рис. 8.10. Экспериментальный спектр рассеянного излучения на одиночной серебряной наносфере ($r_s = 30$ нм), частично погруженной в водный раствор сахарозы различной концентрации [6]

Из приведенного рисунка следует, что максимум спектра рассеянного излучения смещается в область больших длин волн («красный» сдвиг) по мере увеличения концентрации сахарозы в воде, т. е. с увеличением показателя преломления матрицы в соответствии с формулой (8.86). Анализ показывает, что сдвиг спектрального максимума линейно зависит от концентрации сахарозы и его величина находится в соответствии с предсказанием теории Ми. Таким образом, по сдвигу максимума в спектре рассеянного серебряной наносферой излучения можно определить концентрацию сахарозы в водном растворе, в который погружена наночастица.

Возможность детектирования малых концентраций растворенных веществ вышеописанным способом определяется величиной сдвига максимума, спектральной чувствительностью установки и шириной плазмонного резонанса. В настоящее время сдвиг максимума спектра излучения при рассеянии на одиночной наносфере может быть надежно зарегистрирован вплоть до величины $\Delta\lambda = 2$ нм. Величина сдвига максимума под воздействием заданной матрицы может

быть увеличена при замене наносфер на наностержни. При такой замене уменьшается ширина плазмонного резонанса, что также увеличивает чувствительность метода. Измерения показывают, что сдвиг спектрального максимума, обусловленный влиянием матрицы, составляет 20 % от ширины плазмонного резонанса для золотой наносферы и 80 % для золотого наностержня такого же объема для плазмонной моды, ориентированной вдоль оси стержня. Вместо наностержня для увеличения чувствительности сенсоров на металлических наночастицах могут использоваться пары близкорасположенных наносфер. Другим достоинством наностержней по сравнению с наносферами является большая эффективность рассеяния излучения, обусловленная большой величиной поляризуемости и большим квантовым выходом. Таким образом, металлические наностержни являются идеальным решением для сенсоров, основанных на поверхностных плазмонах. Они сочетают большую чувствительность частоты плазмонного резонанса к материалу матрицы, малую спектральную ширину резонанса и высокую эффективность рассеяния излучения.

Металлические наночастицы, помещенные в раствор, могут служить также сенсорами электрического заряда, возникающего на их поверхности в результате взаимодействия с молекулами растворителя. Наличие избыточного количества электронов в наночастице приводит к увеличению концентрации электронов проводимости, что увеличивает плазменную частоту в соответствии с формулой

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m^*}}$$

и частоту плазмонного резонанса (8.86), вызывая тем самым так называемый «синий» сдвиг в спектре рассеянного излучения.

Наконец, еще одним применением металлических наночастиц может быть их использование для электрического управления переключением света, что важно для современных оптических телекоммуникационных технологий и дисплейных систем. В этом случае имеет место активное воздействие на плазмонный резонанс в результате приложения постоянного электрического поля к металлической наночастице, помещенной, например, в жидкий кристалл. Электрическое поле меняет локальное значение диэлектрической проницаемости матрицы, что и приводит к сдвигу спектрального максимума в рассеиваемом излучении. При возбуждении плазмонного резонанса лазерным излу-

чением с узкой спектральной шириной сдвиг максимума проявляется как изменение интенсивности рассеянного света. Указанное обстоятельство демонстрируется рис. 8.11 для двух серебряных наночастиц, помещенных в различные домены жидкого кристалла, отличающиеся направлением вектора спонтанной поляризации.

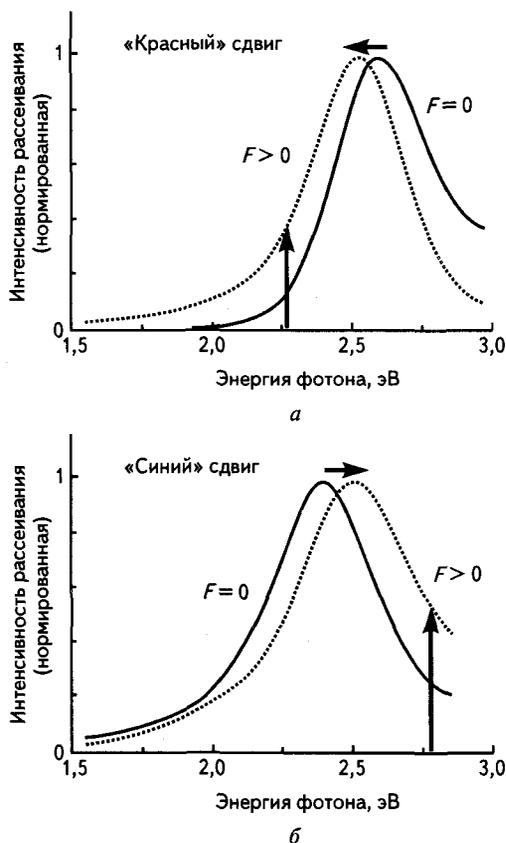


Рис. 8.11. «Красный» (а) и «синий» (б) сдвиги плазмонного резонанса при рассеянии излучения на серебряных наночастицах, помещенных в различные домены жидкого кристалла, при приложении постоянного электрического поля [6]

Существенно, что электрически индуцированное изменение диэлектрической проницаемости является анизотропным, поэтому возникает зависимость спектра рассеянного излучения от поляризации

возбуждающего света. Если излучение поляризовано параллельно вектору напряженности постоянного электрического поля, возникает «синий» сдвиг спектра рассеянного излучения, если перпендикулярно — «красный» сдвиг. Таким образом, с помощью переключения поляризации возбуждающего света можно управлять эффективностью рассеяния излучения на металлических наночастицах в рассматриваемой схеме.

Литература

1. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. М.: Физматлит, 2001. 720 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Физматлит, 2003. 534 с.
3. Платцман Ф., Вольф П. Волны и взаимодействия в плазме твердого тела. М.: Мир, 1975. 440 с.
4. Гинзбург В.Л., Цытович В.Н. Переходное излучение и переходное рассеяние. М.: Наука, 1984. 360 с.
5. Van de Hulst H.C. Light scattering by small particles. NY: Dover Publications, 1981. 470 p.
6. Sonnichsen C. Plasmons in metal nanostructures. Gottingen: Cuvillier Verlag, 2001. 134 p.
7. Johnson P.B., Chirsty R.W. Optical constants of the noble metals. Phys. Rev. B. 1972. V. 6. P. 4370—4379.

При воздействии на вещество мощных резонансных импульсов электромагнитного поля, длительность которых меньше характерных времен релаксации возбуждаемого перехода, возникает специфический нестационарный отклик вещества на электромагнитное возбуждение, физической основой которого является наведение когерентности в ансамбле возбуждаемых частиц. Когерентность означает сфазированность квантовых состояний, между которыми совершается электронный переход. Для наблюдения когерентных нестационарных явлений амплитуда электрического поля в излучении должна удовлетворять условию $E_0 > \hbar\gamma_0/d_0$, а длительность электромагнитного импульса Δt — неравенству $\Delta t < \gamma_0^{-1}$ (d_0 , γ_0 — дипольный момент и ширина спектральной линии возбуждаемого перехода). Данным условиям, как правило, удовлетворяют электромагнитные импульсы пикосекундного и фемтосекундного диапазонов. Такие импульсы генерируются в современных лазерных установках, наиболее мощные из которых перечислены в табл. 7.2. Для описания когерентных процессов, возникающих при таком импульсном возбуждении, удобно использовать наглядный геометрический подход, основанный на формализме оптического вектора Блоха.

9.1. ФОРМАЛИЗМ ОПТИЧЕСКОГО ВЕКТОРА БЛОХА И ПРОСТЕЙШИЕ КОГЕРЕНТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

В случае резонансного воздействия на оптический переход достаточного интенсивного излучения для описания поведения квантовой системы может оказаться недостаточным использо-

вание теории возмущений. Такой случай был рассмотрен в разд. 6.6 с помощью решения уравнения Шредингера для двухуровневой системы в приближении вращающейся волны. Было, в частности, показано, что зависимость населенностей от времени носит осциллирующий характер — осцилляции Раби. Существует наглядный способ описания временных осцилляций характеристик двухуровневой системы, обладающей ненулевым электрическим дипольным моментом перехода, с помощью вращения трехмерного вектора в некотором математическом пространстве. Этот способ заимствован из физики магнитного резонанса, когда указанный вектор представляет собой магнитный момент, а пространство является обычным геометрическим. При переходе к рассмотрению взаимодействия оптического излучения роль магнитного момента, как правило, играет электрический дипольный момент, и трехмерный вектор, изображающий двухуровневую систему, называется *оптическим вектором Блоха* [1].

Математическое определение оптического вектора Блоха \mathbf{R} удобно дать с использованием матриц Паули σ_j как среднее по состоянию двухуровневой системы $\langle t \rangle$:

$$\langle t \rangle = a_1(t)|1\rangle + a_2(t)|2\rangle, \quad (9.1)$$

где $|1\rangle, |2\rangle$ — кет-векторы Дирака, обозначающие нижнее и верхнее энергетические состояния. Энергии этих состояний равны E_1, E_2 , а собственная частота

$$\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}.$$

Коэффициенты разложения $a_{1,2}(t)$ являются комплексными функциями, определяющими временную зависимость состояния квантовой системы. По предположению электрический дипольный момент перехода

$$d_0 \equiv \langle 2 | \hat{d} | 1 \rangle$$

не равен нулю. В дальнейшем будем опускать векторные обозначения у дипольного момента, предполагая напряженность электрического поля параллельной оси z .

Формула (9.1) представляет собой разложение произвольного состояния двухуровневой системы по стационарным состояниям, в которых сохраняется энергия системы.

Матрицы Паули, описывающие, как известно, частицу со спином $1/2$, равны:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.2)$$

Матрицы Паули удовлетворяют важному коммутационному соотношению:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (9.3)$$

где $[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}$ — коммутатор; ε_{ijk} — абсолютно антисимметричный объект третьего ранга (символ Леви—Чевита), равный нулю, если хотя бы два его индекса совпадают, единице — если они представляют собой четную перестановку чисел 1, 2, 3, и минус единице — в противном случае. Справедливость (9.3) можно проверить непосредственно, воспользовавшись явным видом матриц Паули (9.2).

С использованием формул (9.2) можно дать следующее определение компонент оптического вектора Блоха [1]:

$$R_j = \bar{a}^+ \sigma_j \bar{a} \equiv \langle \sigma_j \rangle, \quad (9.4)$$

где \bar{a} — двухмерный вектор-столбец с компонентами $a_{1,2}$; \bar{a}^+ — эрмитовски сопряженный вектор (строка), угловые скобки обозначают усреднение по вектору состояния двухуровневой системы (9.1). Определение (9.4) можно переписать в виде:

$$R_1 = a_1 a_2^* + a_1^* a_2 = 2 \operatorname{Re} \{ a_1 a_2^* \}; \quad (9.5a)$$

$$R_2 = i (a_1 a_2^* - a_1^* a_2) = -2 \operatorname{Im} \{ a_1 a_2^* \}; \quad (9.5b)$$

$$R_3 = |a_1|^2 - |a_2|^2. \quad (9.5в)$$

Если теперь ввести инверсию населенностей двухуровневой системы $N = N_2 - N_1$ ($N_j = |a_j|^2$), то вместо (9.5в) имеем:

$$R_3 = -N \equiv N_1 - N_2, \quad (9.6)$$

т. е. третья компонента оптического вектора Блоха с точностью до знака равна инверсии населенностей.

Определим среднее значение дипольного момента двухуровневой системы, находящейся в состоянии $|t\rangle$, для которого справедливо разложение (9.1):

$$d(t) \equiv \langle t | \hat{d} | t \rangle = (a_1 a_2^* + a_1^* a_2) d_0 = R_1 d_0. \quad (9.7)$$

При записи (9.7) было учтено равенство

$$\langle 2 | \hat{d} | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{d} | 2 \rangle,$$

которого можно добиться соответствующим выбором волновых функций состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Таким образом, первая компонента оптического вектора Блоха определяет временную зависимость среднего дипольного момента двухуровневой системы. Чтобы выяснить физический смысл второй компоненты вектора Блоха, введем комплексный дипольный момент согласно равенству:

$$\vec{d} \equiv \vec{d}_1 + i\vec{d}_2 = 2d_0 a_2 a_1^*. \quad (9.8)$$

Тогда

$$d(t) = \text{Re} \{ \vec{d}(t) \} = \vec{d}_1(t) = d_0 R_1. \quad (9.9)$$

Мнимая часть \vec{d}_2 позволяет определить фазу среднего дипольного момента, которая совпадает с углом в комплексной плоскости вектора \vec{d} :

$$\varphi = \arctg \left(\frac{\vec{d}_2}{\vec{d}_1} \right) = \arg(\vec{d}). \quad (9.10)$$

В то же время \vec{d}_2 выражается через вторую компоненту вектора Блоха:

$$\vec{d}_2 = d_0 R_2. \quad (9.11)$$

Итак, формулы (9.6)—(9.11) дают физическую интерпретацию оптического вектора Блоха. Отметим, что комплексный вектор среднего дипольного момента (9.8) позволяет наглядно представить фазу

дипольного момента как угол вращения вектора \vec{d} в комплексной плоскости.

Третья компонента оптического вектора Блоха связана со средней энергией квантовой системы согласно равенству:

$$\langle E \rangle \equiv \langle t | \hat{H}_0 | t \rangle = E_1 |a_1|^2 + E_2 |a_2|^2 = -\hbar\omega_0 \frac{R_3}{2}, \quad (9.12)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан невозмущенной двухуровневой системы. При записи (9.12) было учтено, что по определению $\hat{H}_0 |j\rangle = E_j |j\rangle$ ($j = 1, 2$), а также выбрано начало отсчета энергии, такое, что $E_1 + E_2 = 0$ (рис. 9.1).

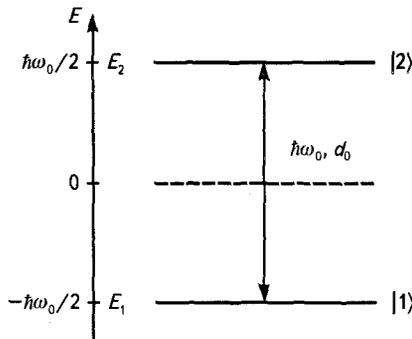


Рис. 9.1. Спектроскопический переход в двухуровневой системе

Вследствие условия нормировки для вектора состояния $\langle t | t \rangle = 1$ оптический вектор Блоха также нормирован:

$$|\mathbf{R}\rangle = \sqrt{R_1^2 + R_2^2 + R_3^2} = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \quad (9.13)$$

Нормировка (9.13) нарушается при учете возможности перехода электрона в другие квантовые состояния. Схематическое изображение вектора и сферы Блоха приведено на рис. 9.2.

Вектор Блоха двухуровневой системы является геометрическим образом такого важного понятия квантовой информатики как квантовый бит или кубит (q-бит). Если в обычной (неквантовой) информатике единицей измерения информации является бит, который, как известно, может принимать всего два значения 0 или 1, единица измерения в квантовой информатике — кубит — принимает конти-

нуум значений. Этот континуум значений отвечает всем точкам на сфере Блоха (см. рис. 9.2), которые описывает конец вектора Блоха при изменении его азимутального φ и полярного θ углов.

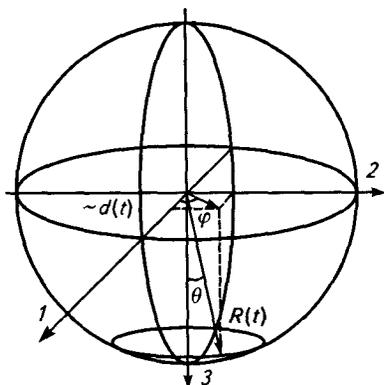


Рис. 9.2. Вектор и сфера Блоха

Нетрудно показать, что временной эволюции невозмущенной двухуровневой системы соответствует *свободная прецессия* оптического вектора Блоха. Так называется вращение вектора вокруг третьей оси с угловой скоростью, равной собственной частоте перехода ω_0 . Свободная прецессия отвечает сохранению энергии квантовой системы в отсутствие возмущения. Свободная прецессия вырождается, если вектор Блоха находится в одном из стационарных состояний $|1\rangle$ или $|2\rangle$, в чем, в частности, отражается их стационарность.

При рассмотрении временной эволюции оптического вектора Блоха удобно представлять себе третью ось, направленной вниз, как это изображено на рис. 9.2. Тогда в случае, если квантовая система находится в нижнем (по энергии) стационарном состоянии $|1\rangle$, то вектор Блоха направлен вертикально вниз, если же она находится в верхнем стационарном состоянии $|2\rangle$, то вертикально вверх. Легко видеть, что в стационарных состояниях один из коэффициентов в разложении (9.1) равен нулю, поэтому равен нулю средний дипольный момент двухуровневой системы. Напротив, если оптический вектор Блоха лежит в горизонтальной плоскости, когда

$$|a_1(t)| = |a_2(t)| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (9.14)$$

то амплитуда дипольного момента максимальна и равна [с учетом нормировки (9.13)] $1/\sqrt{2}$. Состояния, определяемые равенством (9.14), называются *когерентными*, или *суперпозиционными*, в них инверсия населенностей равна нулю.

Если на двухуровневую систему действует электромагнитное поле, эволюция оптического вектора Блоха, естественно, отличается от свободной прецессии и может быть описана с помощью уравнения [1]:

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \times \mathbf{W}, \quad (9.15)$$

где $\mathbf{W} = [2\Omega(t), 0, \omega_0]$ — вектор обобщенной угловой скорости; $\Omega(t)$ — зависящая от времени «мгновенная» частота Раби:

$$\Omega(t) = \frac{d_0 E(t)}{\hbar},$$

$E(t)$ — напряженность электрического поля. Равенство (9.15) можно получить с помощью уравнения Шредингера для двухуровневой системы.

Из уравнения (9.15) следует, что существует механическая аналогия для оптического перехода во внешнем монохроматическом поле. Вектор Блоха аналогичен моменту количества движения гироскопа: он прецессирует вокруг мгновенного направления обобщенной угловой скорости $\mathbf{W}(t)$. Эта угловая скорость определяется собственной частотой двухуровневой системы и параметрами внешнего поля. В случае свободной прецессии, когда $\Omega(t) = 0$, вектор Блоха, как это следует из (9.15), вращается против часовой стрелки вокруг положительного направления оси 3 . Наложение внешнего поля приводит к дополнительному вращению вокруг оси 1 со значительно меньшей угловой скоростью, поскольку, как правило, $|\Omega(t)| \ll \omega_0$. Последнее неравенство означает, что внешнее поле существенно меньше собственного поля двухуровневой системы, определяющего частоту ω_0 .

В случае околорезонансного внешнего поля ($|\omega - \omega_0| \leq \gamma_0 \ll \omega$), который мы и будем предполагать в данном разделе, описанную выше картину движения оптического вектора Блоха можно существенно упростить. Для этого следует перейти в систему координат, вращающуюся вокруг оси 3 против часовой стрелки с угловой скоростью, равной частоте внешнего поля ω . Интуитивно понятно, что

тогда можно в значительной степени «уловить» изменение во времени первой компоненты вектора обобщенной угловой скорости $\mathbf{W}(t)$, равной удвоенной мгновенной частоте Раби. Если при этом пренебречь в полученной системе уравнений слагаемыми, осциллирующими на удвоенной частоте внешнего поля (приближение «вращающейся волны» или резонансное приближение), то можно получить следующее уравнение для оптического вектора Блоха \mathbf{R}_0 во вращающейся системе координат:

$$\frac{d\mathbf{R}_0}{dt} = \mathbf{R}_0 \times \mathbf{W}_0; \quad \mathbf{W}_0 = (2\Omega_0, 0, \Delta), \quad (9.16)$$

где $\Omega_0 = d_0 E_0 / 2\hbar$ — резонансная частота Раби; $\Delta = \omega_0 - \omega$ — частотная отстройка от резонанса, а внешнее поле предполагается изменяющимся по закону $E = E_0 \cos(\omega t)$. Подчеркнем, что введенная в (9.16) эффективная угловая скорость \mathbf{W}_0 является постоянной величиной в отличие от аналогичного вектора \mathbf{W} , фигурирующего в формуле (9.15). Именно это обстоятельство позволяет упростить картину временной эволюции оптического вектора Блоха. Действительно, из (9.16) следует, что вектор Блоха во вращающейся системе координат в резонансном приближении прецессирует вокруг вектора эффективной угловой скорости \mathbf{W}_0 , модуль которой равен:

$$|\mathbf{W}_0| = 2\Omega = \sqrt{4\Omega_0^2 + \Delta^2}, \quad (9.17)$$

где Ω — обобщенная частота Раби, учитывающая отстройку частоты внешнего поля от собственной частоты двухуровневой системы.

Остановимся подробнее на случае точного резонанса $\Delta = 0$, когда временная эволюция вектора \mathbf{R}_0 выглядит наиболее просто. Уравнение (9.16) при начальном условии $\mathbf{R}_0 = (0, 0, 1)$, соответствующем нахождению системы в начальный момент времени в нижнем энергетическом состоянии, имеет следующее решение:

$$\mathbf{R}_0(t) = [0, -\sin(2\Omega_0 t), \cos(2\Omega_0 t)]. \quad (9.18)$$

Отсюда вытекает, что в данном случае оптический вектор Блоха под действием внешнего резонансного поля вращается вокруг оси l с угловой скоростью, равной удвоенной резонансной частоте Раби. Таким образом, двухуровневая система будет последовательно переходить из одного стационарного состояния в другое. В промежуточные между этими событиями моменты времени квантовая система

будет находиться в суперпозиционном состоянии с отличным от нуля средним дипольным моментом. Поскольку энергия квантовой системы (9.12) пропорциональна третьей компоненте вектора Блоха, то согласно (9.18) она будет периодически изменяться во времени. Соответственно интенсивность резонансного излучения, вызывающего вращение вектора Блоха, будет также периодически изменяться во времени. Это явление называется *оптической нутацией*.

Для описания импульсного электромагнитного воздействия на двухуровневую систему удобно ввести понятие *площади импульса* θ , равной по определению

$$\theta = 2 \int_0^{\Delta t} \Omega_0 dt, \quad (9.19)$$

где Δt — длительность импульса. В случае прямоугольного импульса из формулы (9.19) имеем: $\theta = 2\Omega_0\Delta t$. Теперь, как это следует из (9.18), если $\mathbf{R}_0 = (0, 0, 1)$, вектор Блоха в начальный момент времени направлен вертикально вниз, воздействие на систему « $\pi/2$ -импульса» ($\theta = \pi/2$) переведет вектор \mathbf{R}_0 в горизонтальную плоскость. В результате двухуровневая система окажется в когерентном состоянии с максимально возможным средним дипольным моментом. Если же площадь импульса равна π (« π -импульс»), вектор Блоха \mathbf{R}_0 опишет развернутый угол, и двухуровневая система перейдет в верхнее стационарное состояние. Ясно, что 2π -импульс не изменит состояние двухуровневой системы.

Чтобы получить выражения для наблюдаемых величин, нужно от формул для вектора Блоха во вращающейся системе координат перейти в лабораторную систему отсчета. Тогда для инверсии населенностей и среднего дипольного момента одной двухуровневой системы находим

$$N = -R_3 = -R_{03} = -\cos(2\Omega_0 t); \quad (9.20)$$

$$d(t) = d_0 R_1(t) = d_0 [R_{01} \cos(\omega t) - R_{02} \sin(\omega t)]. \quad (9.21)$$

В отсутствие переменного возмущения ($\omega = 0$ и $R_1 = R_{01}$) из последнего равенства следует формула (9.7), как и должно быть. Напомним, что (9.21) получено для электромагнитного возмущения, в котором $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$, т. е. имеет ту же временную зависимость, что и первое слагаемое в круглых скобках (9.21). Поэтому

данное слагаемое называется *синфазной компонентой* дипольного момента. Второе слагаемое в круглых скобках (9.21) сдвинуто по фазе на $\pi/2$ и описывает *квадратурную компоненту* дипольного момента. Поскольку средняя за период $T = 2\pi/\omega$ мощность электромагнитного взаимодействия равна $\langle \dot{d}(t) E(t) \rangle_T$, то отсюда и из (9.21) следует, что обмен энергией между излучением и квантовой системой определяется квадратурной компонентой дипольного момента, т. е. второй проекцией оптического вектора Блоха во вращающейся системе координат $R_{02}(t)$.

В случае точного резонанса $\Delta = 0$ формулы (9.18) из (9.21) дают:

$$d(t) = d_0 \sin(2\Omega_0 t) \sin(\omega t). \quad (9.22)$$

Отсюда видно, что временная зависимость среднего дипольного момента двухуровневой системы содержит быстроосциллирующую часть на частоте внешнего поля и амплитуду, медленно меняющуюся с удвоенной частотой Раби Ω_0 . В случае $\Delta \neq 0$ осцилляции компонент вектора R_0 будут происходить на частоте 2Ω с амплитудой, меньшей единицы. Важно отметить, что, как это следует из (9.20), в пренебрежении релаксационными процессами инверсия населенностей двухуровневой системы под воздействием резонансного поля с площадью импульса π может быть сделана равной единице.

Выражение для макроскопической поляризации $P(t)$, связанной с ансамблем двухуровневых систем в пренебрежении разбросом собственных частот, получается из (9.22) умножением на концентрацию двухуровневых систем N_0 .

Скорость обмена энергией между электромагнитным полем и ансамблем двухуровневых систем в единице объема, усредненная за период оптического колебания $T = 2\pi/\omega$, дается выражением

$$W_p = \langle \dot{P}E \rangle_T = -N_0 \hbar \omega \Omega_0 R_{02}(t). \quad (9.23)$$

Итак, мощность, поглощаемая/излучаемая единицей объема среды под действием внешнего резонансного излучения, определяется компонентой оптического вектора Блоха R_{02} , т. е. квадратурной (сдвинутой по фазе на $\pi/2$ по отношению к внешнему полю) составляющей наведенной поляризации. Синфазная составляющая поляризации, пропорциональная компоненте R_{01} , не влияя на энергообмен, изменяет фазовую скорость излучения в среде.



В случае $\Delta = 0$ из формул (9.23) и (9.18) находим:

$$W_p(\Delta = 0) = N_0 \hbar \omega \Omega_0 \sin(2\Omega_0 t). \quad (9.24)$$

Отсюда следует, что обмен энергией между ансамблем двухуровневых систем и резонансным электромагнитным полем происходит наиболее эффективно при $\Omega_0 t = \pi/4$, когда инверсия населенностей равна нулю, и двухуровневые системы находятся в когерентном состоянии. Поскольку в начальный момент времени система находилась в нижнем энергетическом состоянии, то ясно, что при $2\Omega_0 t \in [0, \pi]$ энергия передается от поля к ансамблю двухуровневых систем. В следующие полпериода, когда $W_p < 0$, над системой совершается отрицательная работа, т. е. она отдает энергию электромагнитному полю.

Формула (9.24) описывает когерентное явление, называемое *оптической нутацией*. Оно заключается в периодическом (с частотой Раби) изменении интенсивности резонансного излучения, проходящего через ансамбль двухуровневых систем. Принципиальным условием возникновения этого эффекта является сохранение когерентности в двухуровневой системе в течение импульса внешнего поля.

Выпишем выражение для работы, совершаемой над ансамблем двухуровневых систем в единице объема импульсом резонансного электромагнитного поля прямоугольной формы длительности Δt :

$$A = \int_0^{\Delta t} W_p(t) dt = \hbar \omega N_0 \sin^2(\Omega_0 \Delta t). \quad (9.25)$$

Данная формула верна для достаточно коротких импульсов, когда не успевают сказаться релаксационные процессы $\Delta t < T_2$ и для случая точного резонанса $\omega = \omega_0$. Из нее вытекает парадоксальное, на первый взгляд, следствие: если площадь импульса равна целому кратному 2π , то импульс резонансного излучения проходит через ансамбль двухуровневых систем без ослабления. Это явление называется *самоиндуцированной прозрачностью* и реально наблюдается в случае специальной временной формы импульса, учитывающей координатную зависимость величин. Отметим, что принятое здесь резонансное условие $\Delta = 0$ на самом деле может выполняться только приближенно с точностью до неоднородного уширения линии в ансамбле двухуровневых систем.

9.2. УШИРЕНИЕ ЛИНИИ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОГО ПЕРЕХОДА И «ВЫЖИГАНИЕ ПРОВАЛОВ»

В реальности двухуровневая система всегда входит в состав некоторой макроскопической системы, называемой термостатом. Взаимодействие с ним существенным образом влияет на динамику двухуровневой системы, вызывая различные релаксационные процессы. Описание эволюции двухуровневой системы в монохроматическом поле, данное в предыдущем разделе, справедливо в той мере, в которой данной релаксацией можно пренебречь. Ниже будет показано, что это возможно для достаточно малых времен. При больших временах необходимо учитывать релаксацию двухуровневой системы под действием термостата. Это можно сделать, например, в рамках формализма матрицы плотности, которая в данном случае играет роль вектора состояния (или волновой функции) системы. Элементы матрицы плотности могут быть определены с помощью равенства [2]:

$$\rho_{ij} = \langle a_i a_j^* \rangle_{\text{Therm}}, \quad (9.26)$$

где a_j — коэффициенты разложения вектора состояния системы по стационарным состояниям (9.1). Угловые скобки в равенстве (9.26) обозначают усреднение по термостату.

Взаимодействие с термостатом переводит двухуровневую систему в так называемое смешанное состояние. В нем в отличие от чистого состояния не существует волновой функции, и можно говорить лишь о распределении квантовой системы по энергетическим состояниям $|n\rangle$ с некоторыми вероятностями w_n . Характерным свойством смешанного состояния является тот факт, что $w_n \neq 1$ ни при каком n . Распределение w_n отражает неполноту наших сведений о двухуровневой системе. Эта неполнота связана с влиянием термостата, который стохастическим образом «перемешивает» состояния $|n\rangle$. Указанное «перемешивание» состояний приводит к тому, что к квантово-механической неопределенности в описании системы добавляется еще и статистическая неопределенность. Наиболее полная информация о системе, позволяющая вычислять средние значения физических величин, дается в этом случае матрицей плотности ρ_{ij} , определенной формулой (9.26). Существует простой критерий,



по которому можно установить, является ли данное состояние чистым или оно смешанное. В любом случае выполняется неравенство Коши—Буняковского:

$$\rho_{ij}\rho_{ji} \leq \rho_{ii}\rho_{jj}. \quad (9.27)$$

Чистое состояние соответствует равенству в этом соотношении, смешанное — строгому неравенству.

Переход от волновой функции к матрице плотности формально соответствует замене $a_i a_j^* \rightarrow \rho_{ij}$. Поэтому обобщение определения оптического вектора Блоха (9.5) на случай смешанного состояния двухуровневой системы имеет вид:

$$\mathbf{R} = (2 \operatorname{Re} \{\rho_{12}\}, 2 \operatorname{Im} \{\rho_{12}\}, \rho_{11} - \rho_{22}). \quad (9.28)$$

Легко увидеть, что определение (9.28) в случае чистого состояния совпадает с определением (9.5), если воспользоваться формулой (9.26), выражающей компоненты матрицы плотности через коэффициент разложения волновой функции системы по векторам стационарных состояний в пренебрежении влияния термостата. Физический смысл компонент вектора Блоха в смешанном состоянии тот же, что и в чистом состоянии.

Взаимодействие с термостатом обычно описывается в рамках феноменологического подхода с помощью двух времен релаксации: $T_{1,2}$. Время поперечной релаксации T_2 описывает релаксацию компонент вектора Блоха $R_{1,2}$. Время продольной релаксации T_1 описывает релаксацию компоненты вектора Блоха R_3 . Термины «продольная» и «поперечная» возникли при рассмотрении магнитного резонанса, когда ось Z задается направлением постоянного магнитного поля. Физический смысл этих времен следующий. Время T_2 описывает релаксацию усредненного по взаимодействию с термостатом дипольного момента отдельно взятой двухуровневой системы с данной собственной частотой ω_0 . Это время называется также временем фазовой релаксации, поскольку оно связано с релаксацией разности фаз стационарных состояний рассматриваемого перехода под действием термостата. Время T_1 характеризует скорость релаксации средней энергии в системе. Оно также называется временем релаксации населенностей, поскольку энергия квантовой системы определяется населенностями ее уровней. В случае магнитного резонанса продольная (по отношению к направлению постоянного магнитного поля) составляющая намагни-

ченности связана с энергией системы спинов, а поперечная составляющая определяет связь спинов с переменным магнитным полем, вызывающим вращение спина в пространстве.

Модифицированное уравнение (9.27) для временной эволюции оптического вектора Блоха с учетом релаксации имеет вид:

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \times \mathbf{W} - \frac{\mathbf{R}_\perp}{T_2} + \frac{\mathbf{R}_3^e - \mathbf{R}_3}{T_1}, \quad (9.29)$$

где $\mathbf{W} = (2\Omega(t), 0, -\omega_0)$ — вектор обобщенной угловой скорости; \mathbf{R}_3^e — равновесное значение третьей компоненты оптического вектора Блоха. При записи (9.29) было учтено, что термодинамически равновесное значение \mathbf{R}_1^e равно нулю согласно основополагающим принципам статистической физики, а $\mathbf{R}_3^e \neq 0$. Данное обстоятельство связано с тем, что поперечная составляющая вектора Блоха определяется недиагональными компонентами матрицы плотности, а его третья компонента — диагональными. Первое слагаемое в правой части (9.29) описывает взаимодействие двухуровневой системы с монохроматическим полем, остальные — релаксацию под действием термостата.

Переход во вращающуюся систему координат не изменяет релаксационных членов, и соответствующее уравнение имеет вид:

$$\frac{d\mathbf{R}_0}{dt} = \mathbf{R}_0 \times \mathbf{W}_0 - \frac{\mathbf{R}_\perp}{T_2} + \frac{\mathbf{R}_3^e - \mathbf{R}_3}{T_1}, \quad (9.30)$$

где $\mathbf{W}_0 = (2\Omega, 0, \Delta)$ — угловая скорость во вращающейся системе координат. Напомним, что $\Omega_0 = d_0 E_0 / 2\hbar$ — резонансная частота Раби, $\Delta = \omega - \omega_0$ — отстройка частоты внешнего поля от резонанса. Перепишем векторное уравнение (9.30) в покомпонентном виде:

$$\frac{dR_{01}}{dt} = \Delta R_{02} - \frac{R_{01}}{T_2}; \quad (9.31)$$

$$\frac{dR_{02}}{dt} = -\Delta R_{01} - \frac{R_{02}}{T_2} + 2\Omega_0 R_3; \quad (9.32)$$

$$\frac{dR_{03}}{dt} = -2\Omega_0 R_{02} + \frac{R_3^e - R_3}{T_1}. \quad (9.33)$$

Отметим, что из системы уравнений (9.31)—(9.33) можно получить два уравнения из трех (без уравнения на электромагнитное поле), опи-

сывающие работу лазера в двухуровневом приближении, если соответствующим образом ввести накачку. Это уравнения для поляризации ансамбля двухуровневых систем и для инверсии населенностей.

Решая уравнение (9.30) и переходя в лабораторную систему отсчета, находим следующие выражения для инверсии населенности

$$N = -R_3 = -R_{03} = -\cos(2\Omega_0 t) \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right) \quad (9.34)$$

и для среднего дипольного момента

$$d(t) = d_0 [R_{01} \cos(\omega t) - R_{02} \sin(\omega t)] \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right). \quad (9.35)$$

Полученные решения обобщают результат (9.20) и (9.21) на учет взаимодействия двухуровневой системы с термостатом. Заметим, что экспоненциальный множитель в правой части равенства (9.35) отвечает однородному уширению линии.

Проведенное рассмотрение позволяет сформулировать следующее условие существенности когерентных процессов:

$$\Omega_0 T_2 \gg 1. \quad (9.36)$$

Это условие означает, что за время фазовой релаксации резонансное поле должно успеть повернуть оптический вектор Блоха на заметный угол. В противном случае реализуется предел теории возмущений, предполагающий, что внешнее воздействие слабо меняет состояние квантовой системы.

В случае электромагнитного поля постоянной амплитуды $E_0 = \text{const}$ при достаточно больших временах $t \gg T_{1,2}$ компоненты вектора Блоха во вращающейся системе координат и в приближении вращающейся волны выходят на свои стационарные значения R_0^{st} . Тогда производные по времени в левых частях уравнений (9.31)—(9.33) обращаются в ноль, и значения R_0^{st} можно получить решая систему алгебраических уравнений. Решение имеет вид [3]:

$$R_{01}^{\text{st}} = L(\Delta, s) 2\pi \Delta T_2 \Omega_0 R_3^e; \quad (9.37)$$

$$R_{02}^{\text{st}} = L(\Delta, s) 2\pi \Omega_0 R_3^e; \quad (9.38)$$

$$R_{03}^{\text{st}} = L(\Delta, s) \pi \left(1 + \Delta^2 T_2^2\right) \frac{R_3^e}{T_2}. \quad (9.39)$$

Здесь введена функция $L(\Delta, s)$ — лоренцевский контур с учетом полевого уширения:

$$L(\Delta, s) = \frac{T_2/\pi}{(1 + \Delta^2 T_2^2)(1 + s)}, \quad (9.40)$$

где введен безразмерный параметр насыщения s , равный

$$s = \frac{s_0}{1 + \Delta^2 T_2^2}; \quad s_0 = 4\Omega_0^2 T_1 T_2. \quad (9.41)$$

Здесь s_0 — резонансный параметр насыщения. Выражение (9.40) в пределе нулевого полевого уширения $s = 0$ переходит в обычный лоренцевский контур (4.70).

Формула (9.40) описывает однородное уширение линии. Физический смысл однородного уширения при $s \ll 1$ заключается в том, что линия спектроскопического перехода уширяется в результате сбоя фазы среднего дипольного момента двухуровневой системы — фазовой релаксации. Этот сбой фазы возникает из-за взаимодействия двухуровневой системы со своим окружением: другими двухуровневыми системами и термостатом. Чем больше время фазовой релаксации T_2 , тем уже линия перехода. Взаимодействия, приводящие к однородному уширению, носят динамический характер, они связаны с воздействием на спектроскопический переход переменных полей. Важно подчеркнуть, что эти воздействия одинаковы для всех двухуровневых систем в ансамбле, что и приводит к однородному характеру уширения в отличие от неоднородного уширения. Отметим, что, как это следует из (9.41), параметр насыщения пропорционален интенсивности монохроматического излучения, воздействующего на двухуровневую систему, поскольку $\Omega_0^2 \propto E_0^2$. Лоренцевский контур (9.40) в пределе сильного полевого уширения $s \gg 1$ теряет свой резонансный характер, размываясь по частотной шкале. Физически это связано с тем, что сильное монохроматическое поле, вызывая переходы между энергетическими уровнями квантовой системы, эффективно уменьшает время их жизни. А это в соответствии с соотношением неопределенности Гейзенберга уширяет линию спектроскопического перехода.



Из формул (9.37)—(9.39) можно получить выражение для стационарного угла преломления оптического вектора Блоха (см. рис. 9.2):

$$\theta^{\text{st}} = \arctg \left(\frac{2\Omega_0 T_2 \text{sign}(R_3^e)}{\sqrt{1 + \Delta^2 T_2^2}} \right). \quad (9.42)$$

Выпишем также выражение для стационарной длины поперечной компоненты оптического вектора Блоха:

$$R_{\perp}^{\text{st}} = \frac{|R_3^e| \sqrt{1 + \Delta^2 T_2^2}}{1 + \Delta^2 T_2^2 + 4\Omega_0^2 T_1 T_2}. \quad (9.43)$$

Заметим, что в пределе сильного полевого уширения $s \gg 1$ выражение (9.43) принимает вид:

$$R_{\perp}^{\text{st}} (s \gg 1) \rightarrow \frac{|R_3^e|}{2\Omega_0 T_1 \sqrt{1 + \Delta^2 T_2^2}}. \quad (9.44)$$

Из приведенных формул следует, что стационарная величина поперечной компоненты вектора Блоха при $s \ll 1$ определяется параметром $\Omega_0 T_2$, т. е. углом поворота вектора Блоха под действием монохроматического поля за время поперечной релаксации. В случае сильного насыщения величина R_{\perp}^{st} падает с ростом амплитуды поля. В пределе $\Omega_0 T_2 \gg 1$ из (9.42) имеем: $\theta^{\text{st}} \rightarrow \pi/2$, в то же время из (9.43) следует, что $R_{\perp}^{\text{st}} \rightarrow 0$.

Рассмотрим теперь эффекты насыщения однородно уширенного спектроскопического перехода, вытекающие из формул для стационарных решений уравнений Блоха (9.37)—(9.39). Выпишем сначала выражение для стационарной инверсии населенностей однородно уширенного ансамбля двухуровневых систем в монохроматическом поле. Оно следует из формулы $N^{\text{st}} = N_0 R_3^{\text{st}}$:

$$N^{\text{st}} = \frac{N^e}{1 + s} = \frac{N^e}{1 + 2w_i T_1}, \quad (9.45)$$

где N^e — равновесная инверсия населенностей; w_i — вероятность в единицу времени индуцированного электромагнитным полем перехода между уровнями квантовой системы, которая может быть сле-

дующим образом выражена через резонансную частоту Раби и время поперечной релаксации:

$$w_i = \frac{2\Omega_0^2 T_2}{(1 + \Delta^2 T_2^2)} = 2\pi\Omega_0^2 L(\Delta, s = 0). \quad (9.46)$$

Второе равенство в (9.46) выражает вероятность индуцированного перехода через ненасыщенный лоренцевский контур линии. Оно является аналогом золотого правила Ферми в пределе бесконечно узкой линии, когда $T_2 \rightarrow \infty$ и $L(\Delta) \rightarrow \delta(\Delta)$ (здесь $\delta(\Delta)$ — дельта-функция Дирака).

Из формулы (9.45) вытекает физический смысл параметра насыщения s : он описывает уменьшение стационарной инверсии населенностей под действием электромагнитного поля. Выражение $s = 2w_i T_1$ для параметра насыщения позволяет характеризовать его также как количественную меру конкуренции стимулированных электромагнитным полем переходов в квантовой системе, описываемых величиной w_i , и спонтанных процессов энергетической релаксации со временем T_1 .

Эффект насыщения инверсии населенностей имеет важные следствия. С целью их анализа выпишем выражения для стационарной мощности поглощаемой/излучаемой единицей объема среды, состоящей из двухуровневых систем. Для этого подставим выражение (9.38) для второй компоненты оптического вектора Блоха в формулу для средней мощности (9.23):

$$W_p^{\text{st}} = \frac{W_p^{\text{max}} s}{1 + s} \text{sign}(-N^e); \quad W_p^{\text{max}} = \frac{N^e \hbar \omega_0}{2T_1}. \quad (9.47)$$

Отсюда следует, что, во-первых, характер стационарного обмена энергией между электромагнитным полем и ансамблем двухуровневых систем определяется знаком равновесной инверсии населенностей. Если в отсутствие монохроматического электромагнитного поля система находится в термодинамическом равновесии, при котором $N^e < 0$, то имеет место поглощение энергии поля ансамблем двухуровневых систем: $W_p^{\text{st}} < 0$. В противоположном «лазерном» случае, когда есть накачка и поэтому $N^e > 0$, энергия передается от ансамбля двухуровневых систем электромагнитному полю — происходит усиление излучения. Во-вторых, с ростом интенсивности электромаг-

нитного поля величина W_P^{st} стремится к постоянному значению W_P^{max} . Так что в пределе $s \gg 1$ стационарная мощность вообще перестает зависеть от параметров электромагнитного поля (с точностью до выполнения резонансного условия) и определяется только параметрами двухуровневой системы и термостата. Это и есть эффект насыщения в поглощении/излучении электромагнитного поля однородно уширенным переходом. В случае $N^e < 0$ он приводит к явлению «просветления» среды, что используется, например, в пассивных затворах. В «лазерном» случае ($N^e > 0$) эффект насыщения устанавливает верхний предел мощности лазерной генерации в непрерывном режиме.

Физический смысл описанного явления прост: мощное резонансное излучение делает индуцированные переходы в двухуровневой системе превалирующими над спонтанными, и населенности уровней выравниваются. В результате процессы испускания и поглощения фотонов уравниваются друг друга, и квантовая система эффективно перестает взаимодействовать с электромагнитным полем.

Величина интенсивности электромагнитного поля, при которой наступает насыщение I_{sat} , определяется из условия: $s = 1$. Отсюда находим:

$$I_{\text{sat}} = \frac{c\hbar^2 (1 + \Delta^2 T_2^2)}{4\pi T_1 T_2 d_0^2}. \quad (9.48)$$

Оценим величину интенсивности насыщения для случая ионов неодима в алюмоиттриевом гранате. Тогда $T_1 = 250$ мкс, $T_2 \approx 10^{-11}$ с, $d_0 \approx 3 \cdot 10^{-20}$ ед. СГС. Для точного резонанса $\Delta = 0$ формула (9.48) дает: $I_{\text{sat}} \approx 100$ Вт/см². Оценим величину W_P^{max} для этого случая. Для характерных значений $N^e \approx -10^{19}$ см⁻³, $\hbar\omega_0 \approx 10^{-12}$ эрг находим $W_P^{\text{max}} \approx 20$ кВт/см³. Таким образом, в данном случае насыщение сопровождается сильным разогревом среды.

Рассмотрим более подробно форму линии поглощения/усиления $G(\Delta)$ с учетом насыщения:

$$G(\Delta) = \frac{W_P^{\text{st}}}{W_P^{\text{max}}} = \frac{\Omega_0^2 T_1 T_2}{1 + \Delta^2 T_2^2 + \Omega_0^2 T_1 T_2}. \quad (9.49)$$

Из этой формулы вытекает, что однородная ширина линии $\Delta\omega_h$ растет при насыщении с ростом амплитуды электромагнитного поля:

$$\Delta\omega_h (s \ll 1) = \frac{2}{T_2}; \quad (9.50)$$

$$\Delta\omega_h (s \gg 1) \rightarrow \frac{2\sqrt{1+s_0}}{T_2} = 2\sqrt{\frac{1}{T_2^2} + \frac{4\Omega_0^2 T_1}{T_2}}. \quad (9.51)$$

Формулы (9.50), (9.51) показывают, что присутствие сильного монохроматического поля уширяет лоренцевскую линию перехода в $\sqrt{1+s_0}$ раз по сравнению со случаем слабого поля. Напомним, что $s_0 = 4\Omega_0^2 T_1 T_2$ — резонансный параметр насыщения. Это полевое уширение, вызываемое регулярным (монохроматическим) воздействием, принципиально отличается от релаксационного уширения ($\approx 1/T_2$), обусловленного стохастическим влиянием термостата. Полевое уширение имеет место и в пренебрежении релаксацией, когда можно считать $T_2 \rightarrow 2T_1 \rightarrow \infty$ (для $\Delta \neq 0$). Тогда из формулы (9.49) находим:

$$G(\Delta) \rightarrow \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + 2\Omega_0^2}. \quad (9.52)$$

Отсюда следует, что полевое уширение в отсутствие релаксации определяется резонансной частотой Раби Ω_0 . В общем случае полевое уширение $\Delta\omega_F$ равно:

$$\Delta\omega_F = 4\Omega_0 \sqrt{\frac{T_1}{T_2}}. \quad (9.53)$$

В когерентном случае (9.52) величина полевого уширения определяется энергией взаимодействия электромагнитного поля с наведенным в двухуровневой системе наведенным дипольным моментом, среднее значение которого пропорционально матричному элементу d_0 . Полевое уширение линии связано с уменьшением времени жизни двухуровневой системы в стационарных состояниях из-за индуцированных монохроматическим излучением переходов между уровнями системы.



В присутствии релаксации движение вектора дипольного момента двухуровневой системы можно представить себе как его случайное блуждание в течение T_1 со временем «свободного пробега», равным времени поперечной релаксации T_2 . Параметр T_2 определяет время между «столкновениями», т. е. взаимодействиями, приводящими к сбою фазы. Количество «столкновений» оказывается пропорциональным отношению времен T_1/T_2 . Соответственно эффективная величина среднего дипольного момента, определяющая энергию взаимодействия квантовой системы с электромагнитным полем, равна $d_0\sqrt{T_1/T_2}$. Этот вывод является качественной интерпретацией формулы (9.53).

Как уже говорилось ранее, причиной однородного уширения линии перехода (вне насыщения) является воздействие на него переменных полей, сбивающих фазу дипольного момента двухуровневой системы. Происхождение этих полей зависит от конкретной ситуации. Для газов однородное уширение связано в первую очередь со столкновениями и поэтому определяется давлением газа. Характерная величина $\Delta\omega_h$ в газе составляет примерно $10^7 - 10^8$ Гц. В случае квантовой системы в твердом теле, например активного иона, природа однородного уширения зависит от температуры. При комнатной температуре оно определяется взаимодействием двухуровневой системы с фононами. Характерное значение $\Delta\omega_h$ в твердых телах при $T = 300$ °К составляет $10^{11} - 10^{12}$ Гц. При понижении температуры тепловая концентрация фононов резко падает, а вместе с ней падает и $\Delta\omega_h$. В результате однородная ширина линии перестает зависеть от температуры и начинает определяться взаимодействиями другой природы. Для локализованных в пространстве двухуровневых систем это, как правило, магнитные взаимодействия электронного спина выделенной двухуровневой системы со спинами других квантовых объектов. Такими квантовыми объектами могут быть другие двухуровневые системы в случае их высокой концентрации либо флуктуирующие ядерные магнитные моменты ионов кристаллической решетки. Величина этого вклада в однородную ширину линии существенно зависит от химического состава решетки, в первую очередь от величины магнитных моментов окружающих двухуровневую систему ионов. Таким образом, измерение величины однородного уширения линии в двухуровневой системе при низких температурах может дать ценную информацию о химическом составе окружающего вещества. Предельно малые значения однородного

уширения (при температуре жидкого гелия) достигаются в случае немагнитных ионов решетки. Например, для электронного перехода ${}^7F_0 \rightarrow {}^5D_0$ в ионе европия Eu^{3+} , находящегося в решетке YSiO_3 при температуре $T \approx 1^\circ\text{K}$, величина однородного уширения составляет $\Delta\omega_h \approx 350$ Гц. Это рекордно узкая линия оптического перехода в твердом теле.

Другим принципиально важным типом уширения линии спектроскопического перехода является *неоднородное* уширение. Причина его состоит в неоднородности условий пребывания двухуровневой системы в термостате. Характер этой неоднородности может быть разный. Если двухуровневая система связана с молекулами в газе, то причиной неоднородного уширения является разброс молекул по скоростям. В твердом теле — это неоднородность кристаллического поля в местах расположения квантовых систем. В случае магнитного резонанса — неоднородность постоянного магнитного поля по объему образца. Все эти причины приводят к разбросу собственных частот в ансамбле двухуровневых систем вокруг некоего среднего значения ω_c . В газе это происходит из-за эффекта Доплера, в твердом теле — из-за статического эффекта Штарка, в случае магнитного резонанса — из-за эффекта Зеемана. Характерной особенностью неоднородного уширения является то, что форма линии описывается гауссовой кривой (4.72), независимо от физической реализации уширения. Гауссов вид формы линии связан со статистическим характером неоднородного уширения. Иными словами, с тем, что разброс параметра (скорости молекулы, напряженности внутрискристаллического или магнитного поля), приводящий к уширению, будучи флуктуационным по своей природе, описывается распределением Гаусса для флуктуаций.

Величина неоднородного уширения $\Delta\omega_{\text{inh}}$ для газов зависит от температуры и имеет характерное значение порядка гигагерца. В твердых телах $\Delta\omega_{\text{inh}}$ от температуры не зависит и имеет разброс значений в широких пределах: от долей гигагерца в некоторых кристаллах до терагерц в стеклах.

Таким образом, в газах и стеклах линия спектроскопического перехода уширена неоднородно ($\Delta\omega_{\text{inh}} > \Delta\omega_h$), в кристаллах при комнатной температуре, напротив, превалирует однородное уширение ($\Delta\omega_{\text{inh}} < \Delta\omega_h$). Но и в кристаллах с понижением температуры, начиная с температуры жидкого азота и ниже, неоднородное уширение превосходит однородное.



Отметим, что в случае сильного взаимодействия оптического электрона с колебательными степенями свободы (вибронами, фононами), например, для ионов переходных металлов в твердом теле, F -центров, молекул красителя в растворе уширение линии может носить специфический «вибронный» характер. Это означает, что в процессе излучательного перехода с разной вероятностью возможно испускание или поглощение различного числа фононов (вибронов), что в спектре испускания/поглощения проявляется как уширение линии.

Эффект насыщения в спектре поглощения/испускания неоднородно уширенного перехода проявляется принципиально иным образом в сравнении со случаем однородного уширения. Далее для простоты предполагаем спектр излучения, действующего на ансамбль двухуровневых систем, бесконечно узким. Тогда коэффициент поглощения/усиления ансамбля двухуровневых систем с одинаковой собственной частотой ω' , как это следует из формулы (9.49), имеет вид:

$$\kappa(\Delta = \omega' - \omega) = \frac{W_p^{st}}{cF_0^2/8\pi} = \frac{\sigma_0 N^e}{1 + \Delta^2 T_2^2 + 4\Omega_0^2 T_1 T_2}, \quad (9.54)$$

где σ_0 — резонансное сечение перехода,

$$\sigma_0 = \frac{4\pi\omega' T_2 d_0^2}{\hbar c}.$$

Итак, коэффициент поглощения однородно уширенного перехода при насыщении «проседает» таким образом, что его максимальное значение уменьшается, ширина линии возрастает, а форма остается по-прежнему лоренцевской.

Для того, чтобы получить профиль неоднородно уширенной линии, нужно лоренциан (9.40) свернуть с функцией Гаусса $f_G(\omega, \omega_c)$, описывающей распределение двухуровневых систем в ансамбле по собственным частотам:

$$G^{(inh)}(\omega) = \int d\omega' L(\omega, \omega') f_G(\omega', \omega_c), \quad (9.55)$$

где ω_c — центральная частота неоднородного распределения. Если неоднородное уширение существенно больше однородного, то лоренциан (9.40) можно заменить на дельта-функцию, и интеграл (9.55) дает:

$$G^{(inh)}(\omega, \omega_c) = f_G(\omega, \omega_c), \quad (9.56)$$

т. е. мы приходим к формуле (4.72). Из (9.55) явно видно, что неоднородно уширенная линия представляет собой огибающую однородных контуров.

Пусть на неоднородно уширенный ансамбль двухуровневых систем действует мощное излучение накачки на частоте ω_p . Тогда в равенстве (9.55) необходимо учесть эффект насыщения в однородно уширенном контуре. В результате для неоднородно уширенной линии получаем

$$G_{\text{sat}}^{(\text{inh})}(\omega, \Omega_p) = G^{(\text{inh})}(\omega, \omega_c) \frac{1 + (\omega - \omega_p)^2 T_2^2}{1 + (\omega - \omega_p)^2 T_2^2 + 4\Omega_p^2 T_2 T_1}, \quad (9.57)$$

где Ω_p — частота Раби, соответствующая амплитуде поля накачки E_{0p} ,

$$\Omega_p = \frac{d_0 E_{0p}}{2\hbar};$$

ω — частота пробного поля.

Из выражения (9.57) следует, что излучение накачки вызывает появление спектрального «провала» в контуре поглощения/усиления неоднородно уширенной линии. Глубина этого провала определяется резонансным параметром насыщения

$$s_{0p} = 4\Omega_p^2 T_1 T_2,$$

а спектральная ширина — шириной линии насыщенного однородного контура (для монохроматической накачки). Равенство (9.57) удобно переписать в безразмерных переменных:

$$\nu = \frac{\omega - \omega_c}{\Delta\omega_{\text{inh}}}; \quad r = \frac{\Delta\omega_{\text{inh}}}{\Delta\omega_h}; \quad \tilde{g}_{\text{inh}}^{\text{sat}} = \Delta\omega_{\text{inh}} G_{\text{sat}}^{(\text{inh})}.$$

Тогда вместо (9.57) имеем:

$$\tilde{g}_{\text{inh}}^{\text{sat}}(\nu, s_{0p}) = \frac{\exp(-\nu^2/2)}{\sqrt{2\pi}} \frac{1 + 4r^2 (\nu - \nu_{pc})^2}{1 + 4r^2 (\nu - \nu_{pc})^2 + s_{0p}}, \quad (9.58)$$

где ν_{pc} — нормированная отстройка частоты накачки от центральной частоты неоднородного распределения,

$$\nu_{pc} = \frac{\omega_p - \omega_c}{\Delta\omega_{\text{inh}}}.$$

При записи параметра r было использовано выражение однородной ширины линии через время поперечной релаксации:

$$\Delta\omega_h = \frac{2}{T_2}.$$

График функции (9.58) для двух значений параметра насыщения $s_{0p} = 10; 0,1$ приведен на рис. 9.3.

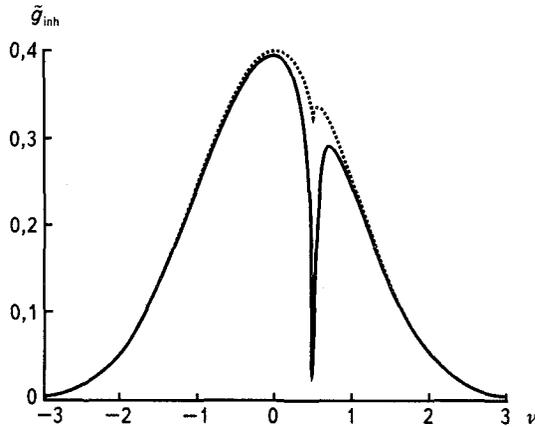


Рис. 9.3. «Выжигание провала» в контуре неоднородно уширенной спектральной линии под действием интенсивного излучения накачки на частоте ω_p для двух значений параметра насыщения $s_{0p} = 10$ (сплошная кривая) и $s_{0p} = 0,1$ (пунктирная)

Расчет проведен по формуле (9.58) для

$$r \equiv \frac{\Delta\omega_{inh}}{\Delta\omega_h} = 30 \quad \text{и} \quad \nu_{pc} \equiv \frac{\omega_p - \omega_c}{\Delta\omega_{inh}} = 0,5.$$

По оси абсцисс графика рис. 9.3 отложена безразмерная частота

$$\nu = \frac{\omega - \omega_c}{\Delta\omega_{inh}},$$

по оси ординат нормированная форма линии

$$\tilde{g}_{inh} = \Delta\omega_{inh} G_{sat}^{(inh)},$$

ω_c — центральная частота неоднородного распределения (4.72).

Это явление, называемое «выжиганием провалов» (hole-burning), используется в лазерной спектроскопии и имеет практические применения, например, для оптической записи информации. В частности, с его помощью можно определить величину однородного уширения линии, даже если оно замаскировано неоднородным уширением.

9.3. ЗАТУХАНИЕ СВОБОДНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ФОТОННОЕ ЭХО

Важнейшей величиной, характеризующей отклик среды на электромагнитное воздействие, является поляризация вещества $P(t)$. Чтобы найти $P(t)$ в резонансном электромагнитном поле, нужно просуммировать дипольный момент (9.35) по ансамблю двухуровневых систем, представляющих вещество. Как уже говорилось в предыдущем разделе, помимо однородного уширения в ансамбле квантовых систем может иметь место неоднородное уширение (4.72), обусловленное разбросом собственных частот ω_0 вокруг некоторой центральной частоты ω_c . Группу двухуровневых систем из ансамбля с одинаковой собственной частотой ω_j будем называть *однородным пакетом*.

Найдем поляризацию среды после воздействия короткого электромагнитного импульса длительности Δt . Суммируя (9.35) по ансамблю однородных пакетов, находим для поляризации следующее выражение:

$$P(t > \Delta t) = -\sum_j d_j R_{1j}(\Delta t) \sin(\omega_j t) \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right). \quad (9.59)$$

Равенство (9.59) получено в предположении точного резонанса $\Delta = 0$, когда можно пренебречь синфазной (по отношению к полю) составляющей дипольного момента. Будем считать, что $d_j = d_0$ и что импульс электромагнитного поля одинаковым образом воздействовал на все квантовые системы в ансамбле. Последнее предположение справедливо для достаточно коротких импульсов поля, когда можно пренебречь собственной прецессией вектора Блоха за время действия импульса. В этом предположении (9.18) дает:

$$R_{1j}(\Delta t) = -R_3^e \sin(\theta), \quad (9.60)$$

где $\theta = 2\Omega_0 \Delta t$ — площадь резонансного импульса (9.19).

Подставляя равенство (9.60) в (9.59) и заменяя суммирование по однородным пакетам интегрированием с функцией неоднородной ширины линии (4.72), получаем

$$P(t > \Delta t) = d_0 N^e e^{-t/T_2} \frac{\sin(\theta)}{2\sqrt{2\pi}} T_2^* \int d\omega' \sin(\omega' t) \exp\left(-\frac{(\omega' - \omega_c)^2 T_2^{*2}}{8}\right), \quad (9.61)$$

где $N^e = R_3^e N_0$; $T_2^* = 2/\Delta\omega_{\text{inh}}$ — время обратимой релаксации. Интегрирование в (9.61) в пренебрежении длительностью импульса дает

$$P(t) = d_0 N^e \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \sin(\theta) \sin(\omega_c t) \exp\left(-\frac{2t^2}{T_2^{*2}}\right). \quad (9.62)$$

Проанализируем физический смысл полученного выражения. Наведенная импульсом резонансного излучения поляризация пропорциональна равновесной инверсии населенностей, матричному элементу дипольного момента перехода и синусу от площади импульса. Она осциллирует во времени с частотой, равной центральной частоте неоднородного контура, а затухание описывается двумя экспонентами. Первая из экспонент в формуле (9.62) описывает затухание среднего дипольного момента выделенной двухуровневой системы. Это затухание называется *необратимой фазовой релаксацией*, так как связано с необратимыми процессами сбоя фазы в пределах однородного пакета под влиянием термостата. Необратимая релаксация имеет экспоненциальный характер и приводит к лоренцевской форме линии перехода.

Вторая экспонента в формуле (9.62) имеет принципиально иное происхождение. Она возникла в результате интерференции вкладов в поляризацию от однородных пакетов с *различными собственными частотами*. Эта интерференция носит деструктивный характер, поскольку различие собственных частот приводит к расфазировке дипольных моментов двухуровневых систем в различных однородных пакетах друг относительно друга. Данная расфазировка порождает взаимную компенсацию вкладов различных однородных пакетов, если $t > \delta\omega^{-1}$, где $\delta\omega$ — разность собственных частот рассматриваемых однородных пакетов. Этот процесс удобно представить геометрически в системе координат вектора Блоха как разворачивание «вее-

ра» элементарных ротаторов R_{01}^j , свернутого в начальный момент времени (непосредственно после возбуждения). Существенно, что последний тип релаксации носит неэкспоненциальный характер и при $T_2^* < T_2$ быстрее «зануляет» поляризацию, чем экспоненциальная «однородная» релаксация. Геометрическое представление расфазировки в неоднородно-уширенном ансамбле изображено на рис. 9.4. На нем изображена система координат вектора Блоха, вращающаяся вокруг третьей оси с угловой скоростью, равной центральной частоте ω_c неоднородного распределения двухуровневых систем по собственным частотам. В этом случае представленная на рисунке частотная отстройка для j -й двухуровневой системы равна $\Delta = \omega_j - \omega_c$. Показано два элементарных ротатора (поперечных составляющих вектора Блоха) из неоднородного ансамбля двухуровневых систем с отстройками собственных частот разных знаков.

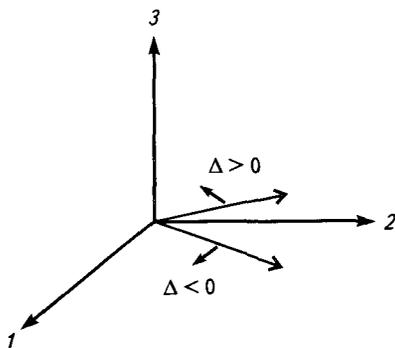


Рис. 9.4. Расфазировка неоднородного ансамбля двухуровневых систем после их возбуждения $\pi/2$ -импульсом в ходе свободной прецессии: «раскрытие веера» элементарных ротаторов

Другим принципиально важным свойством релаксации, вызванной неоднородным уширением, является ее обратимость, т. е. возможность, воздействуя новым электромагнитным импульсом, вызвать рефазировку элементарных ротаторов. Это свойство связано с тем, что в ходе «неоднородной» релаксации сохраняется среднее значение дипольного момента в пределах однородного пакета, поэтому данный тип релаксации также называется *обратимой релаксацией*.

Неэкспоненциальная релаксация переменной поляризации ансамбля двухуровневых систем связана с одним из когерентных эффектов, называемым *затуханием свободной поляризации*. Экспериментальное проявление затухания свободной поляризации заключается

в следующем. При определенных условиях достаточно короткий и мощный импульс резонансного излучения непосредственно после своего воздействия на ансамбль квантовых систем вызывает импульс собственного излучения среды. Это излучение в случае неоднородно уширенного ансамбля двухуровневых систем затухает неэкспоненциальным образом. Постоянная времени этого затухания обратно пропорциональна неоднородной ширине линии. Это и есть импульс затухания свободной поляризации. Напомним, что обычная (некогерентная) люминесценция затухает экспоненциально с постоянной времени T_1 . Эта люминесценция остается после окончания импульса затухания свободной поляризации, но имеет значительно меньшую интенсивность. Непосредственной причиной рассматриваемого когерентного явления является переменная поляризация ансамбля двухуровневых систем (9.62), наведенная импульсом внешнего излучения. В соответствии с уравнениями Максвелла эта поляризация приводит к появлению собственного излучения среды. Выпишем выражение для напряженности электрического поля этого излучения в случае однородной геометрии эксперимента на выходе из образца длины L :

$$E(z = L, t) = -\frac{2\pi\omega_c L}{c} d_0 N^e \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \sin(\theta) \cos(\omega_c t) \exp\left(-\frac{2t^2}{T_2^{*2}}\right). \quad (9.63)$$

Данное выражение можно получить из уравнений Максвелла в приближении вращающейся волны для одномерной задачи. Обратим внимание на то, что порождаемое поляризацией (9.62) электрическое поле (9.63) сдвинуто по фазе на $\pi/2$.

Для интенсивности сигнала затухания свободной поляризации (free induction decay — FID) из (9.63) находим

$$I^{\text{FID}}(t) = \frac{\pi(\omega_c L)^2}{2c} (d_0 N^e)^2 \exp\left(-\frac{2t}{T_2}\right) \sin^2(\theta) \exp\left(-\frac{4t^2}{T_2^{*2}}\right). \quad (9.64)$$

Итак, рассматриваемое излучение затухает с постоянной времени T_2^* . Его интенсивность достигает максимума при $\theta = \pi/2$. Тогда двухуровневая система переводится в когерентное состояние с максимально возможным дипольным моментом. Оценим вели-

чину амплитуды поля для $\pi/2$ -импульса с длительностью $\Delta t \approx 1$ нс и $d_0 \approx 3 \cdot 10^{-20}$ ед. СГС. Из равенства

$$E_0 \Delta t = \frac{\pi \hbar}{2d_0}$$

имеем: $E_0 \approx 15$ кВ/см и $I \approx 3 \cdot 10^5$ Вт/см². Таким образом, необходимая интенсивность излучения достаточно велика и может быть получена только с помощью лазера.

Важной особенностью интенсивности (9.64) является ее квадратичная зависимость от инверсии населенностей и длины образца. Это говорит о когерентном характере процесса в отличие, например, от обычной люминесценции. Подобная квадратичная зависимость характерна для так называемых *сверхизлучательных явлений*.

Следует отметить направленный характер излучения, связанного с затуханием свободной поляризации, что непосредственно не следует из (9.64). Эта направленность возникает из-за того, что когерентный вклад в излучение дают двухуровневые системы только в направлении возбуждающего луча. Выражение (9.64) справедливо для оптически тонкой среды, когда можно пренебречь обратным влиянием собственного излучения на состояние среды. В противном случае ансамбль двухуровневых систем будет слишком быстро терять свою энергию, так что уже нельзя пренебрегать воздействием собственного излучения на состояние ансамбля.

Рассмотрим теперь другой когерентный нестационарный эффект — *фотонное эхо*. Остановимся на его простейшей модификации — первичном, или двухимпульсном, фотонном эхе. Как уже следует из названия, первичное фотонное эхо возникает после воздействия на неоднородный ансамбль двухуровневых систем пары оптических импульсов, разделенных промежутком времени τ . Сигнал первичного эха возникает в момент времени τ после воздействия второго импульса при условии выполнения неравенств:

$$T_2^* < \tau < T_2. \quad (9.65)$$

Как видно из этого выражения, необходимым условием возникновения фотонного эха является превалирование неоднородного уширения над однородным $T_2^* < T_2$. В рассматриваемом процессе

первый импульс возбуждает переменную поляризацию ансамбля двухуровневых систем, которая затухает со временем обратимой релаксации T_2^* согласно формуле (9.64), излучая при этом сигнал затухания свободной поляризации. Второй возбуждающий импульс вызывает *рефазировку* однородных пакетов с различными собственными частотами. Рассмотрим подробнее этот эффект. Будем для простоты предполагать, что первый импульс имеет площадь, равную $\pi/2$, а второй — π , причем длительностью импульсов можно пренебречь по сравнению с промежутком времени между ними Δt_1 , $2 \ll \tau$. Итак, пусть первый импульс внешнего излучения воздействует на термодинамически равновесный ансамбль двухуровневых систем в нулевой момент времени. Тогда, как это следует из решения оптических уравнений Блоха, две первые компоненты вектора Блоха непосредственно перед приходом второго импульса [в момент времени $(\tau - 0)$] равны:

$$R_{1j}(\tau - 0) = R_3^e \sin(\omega_j \tau) \exp\left(-\frac{\tau}{T_2}\right); \quad (9.66)$$

$$R_{2j}(\tau - 0) = -R_3^e \cos(\omega_j \tau) \exp\left(-\frac{\tau}{T_2}\right). \quad (9.67)$$

Второй возбуждающий импульс, площадью π , поворачивает каждый из векторов Блоха (элементарный ротатор) в раскрывающемся «веере» на угол π вокруг оси I (см. рис. 9.4). Для наглядности пренебрегаем различием собственных частот во время действия импульса. В результате первая проекция векторов остается прежней, вторая меняет знак. Поэтому «отстающие» ротаторы (с меньшей собственной частотой) оказываются впереди «опережающих», так что раскрытый «веер» элементарных ротаторов схлопывается. Математически это выглядит следующим образом. Непосредственно после воздействия второго импульса [в момент времени $(\tau + 0)$] из формул (9.66) и (9.67) имеем

$$R_{1j}(\tau + 0) = R_3^e \sin(\omega_j \tau) \exp\left(-\frac{\tau}{T_2}\right); \quad (9.68)$$

$$R_{2j}(\tau + 0) = R_3^e \cos(\omega_j \tau) \exp\left(-\frac{\tau}{T_2}\right). \quad (9.69)$$

Затем вектор Блоха свободно прецессирует, так что решение уравнений (9.29) с начальными условиями (9.68) и (9.69) в момент времени $t = \tau$ дает

$$R_{1j}(t > \tau) = R_3^e \sin[\omega_j(2t - \tau)] \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right). \quad (9.70)$$

Формула (9.70) очень показательна. Временной множитель в аргументе синуса обращается в ноль при $t = 2\tau$. В данный момент времени векторы Блоха всех однородных пакетов, составляющих неоднородно уширенный ансамбль, имеют одинаковую фазу. Это и есть эффект рефазировки, вызванный действием второго импульса. Эффект рефазировки приводит к восстановлению макроскопической поляризации среды, если $\tau < T_2$. Усредняя равенство (9.70) по неоднородному распределению частот, получаем

$$P(t > \tau) = N^e d_0 \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \sin[\omega_c(2\tau - t)] \exp\left(-\frac{2(t - 2\tau)^2}{T_2^{*2}}\right). \quad (9.71)$$

Отсюда находим выражение для интенсивности сигнала двухимпульсного (первичного) фотонного эхо (Two-Pulse Photon Echo — 2PPE):

$$I^{2PPE}(t) = \frac{\pi}{2c} (N^e L \omega_c d_0)^2 \exp\left(-2\frac{t}{T_2}\right) \exp\left(-\frac{4(t - 2\tau)^2}{T_2^{*2}}\right). \quad (9.72)$$

Из полученной формулы следует, что максимум сигнала первичного фотонного эхо приходится на момент времени $t = 2\tau$, длительность импульса фотонного эхо $\approx T_2^*$, а интенсивность квадратична по равновесной инверсии населенностей и длине образца. Этим объясняется сам термин «эхо». Среда «запоминает» воздействие первого (записывающего) импульса. Затем она «откликается» импульсом собственного излучения на воздействие второго (считывающего) импульса. Для плоских фронтов возбуждающих импульсов направление сигнала первичного фотонного эхо определяется его волновым вектором k_s , который равен (условие пространственного синхронизма):

$$k_s = 2k_2 - k_1, \quad (9.73)$$

где k_j — волновой вектор j -го импульса ($j = 1, 2$).

В случае возбуждающих импульсов произвольной площади выражение (9.72) нужно домножить на произведение квадратов синусов: $\sin^2(\theta_1)\sin^2(\theta_2/2)$, что дает зависимость интенсивности первичного фотонного эха от амплитуды возбуждающих импульсов.

Схема первичного фотонного эха, возбуждаемого электромагнитными импульсами с прямоугольной огибающей, представлена на рис. 9.5.

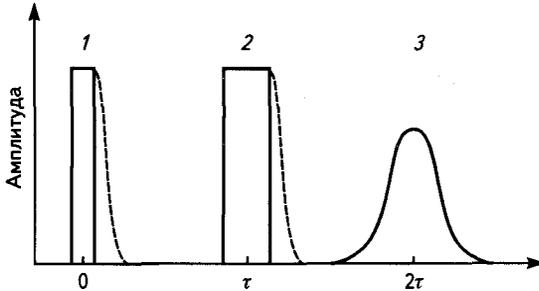


Рис. 9.5. Схема первичного (двухимпульсного) фотонного эха:

1, 2 — возбуждающие импульсы; 3 — сигнал эха; пунктиром показан сигнал затухания свободной поляризации

На рис. 9.5 пунктиром показан также сигналы затухания свободной поляризации, возникающие непосредственно после каждого из возбуждающих импульсов.

Помимо описанного выше первичного фотонного эха, имеет место также стимулированное (трехимпульсное) фотонное эхо. В случае стимулированного фотонного эха роль второго возбуждающего импульса играют два импульса, разделенные интервалом времени $T < T_1$. Можно себе наглядно представить, что при трехимпульсном фотонном эхе рефразирующий поворот векторов Блоха осуществляется в два этапа. Второй импульс (оптимально площади $\pi/2$) переводит дипольный момент каждого однородного пакета в инверсию населенностей, а третий импульс, спустя время T , эту инверсию населенностей вновь обращает в дипольный момент. Существенно то, что при стимулированном фотонном эхе воздействие первого импульса хранится в среде на протяжении времени T в виде инверсии населенностей, которая, как правило, имеет значительно большее время релаксации, чем дипольный момент однородного пакета $T_1 \gg T_2$. Отметим, что выражение для интенсивности стимулированного фотонного эха содержит множитель $\exp(-2T/T_1)$ вместо множителя $\exp(-4\tau/T_2)$ для первичного фотонного эха.

Условие пространственного синхронизма для стимулированного фотонного эха имеет вид

$$k_s = k_3 + k_2 - k_1. \quad (9.74)$$

Из данной формулы следует вышеприведенная интерпретация трехимпульсного эха: если второй и третий импульсы совпадают ($k_3 = k_2$), то (9.74) преобразуется в выражение (9.73) для первичного фотонного эха.

Важной для практических применений разновидностью стимулированного фотонного эха является *долгоживущее фотонное эхо*. В случае долгоживущего эха неравновесная инверсия населенностей, созданная воздействием второго импульса, после оптической релаксации хранится на подуровнях сверхтонкой структуры. Напомним, что сверхтонкие подуровни образуются в результате взаимодействия атомных электронов с магнитным моментом ядра атома. В этом случае при гелиевых температурах время хранения может быть необычно долгим, намного превышающим времена жизни возбужденных электронных состояний.

Различные разновидности фотонного эха нашли широкое применение в лазерной спектроскопии. Их отличительной особенностью является перевод измерений из частотной области во временной диапазон. Это в ряде случаев позволяет получить информацию об очень узких спектральных линиях, замаскированных на частотной шкале неоднородным уширением. Регистрируя зависимость интенсивности сигнала первичного фотонного эха от временного интервала между возбуждающими импульсами, можно по формуле (9.72) определить время необратимой фазовой релаксации T_2 . Аналогичным образом можно измерить время продольной релаксации T_1 , определив интенсивность стимулированного эха как функцию временного интервала между вторым и третьим импульсами. Данный способ определения оптических характеристик вещества называется эхо-спектроскопией.

9.4. ФЕМТОСЕКУНДНОЕ ФОТОННОЕ ЭХО НА НАНОКРИСТАЛЛАХ

В настоящем разделе рассматривается фотонное эхо, возникающее при одновременном когерентном возбуждении двух экситонных переходов в полупроводниковых нанокристаллах под действием фемтосекундных лазерных импульсов [4]. Под нанокрис-

таллом понимается полупроводниковый объект с размером от нескольких нанометров до 100 нм.

Для возникновения квантовых интерференционных явлений в сигнале фотонного эха существенно, что ширина спектра возбуждающих лазерных импульсов в фемтосекундных экспериментах может быть порядка и больше частот переходов между квантово-размерными экситонными уровнями в нанокристалле, поэтому могут одновременно когерентно возбуждаться сразу несколько оптических переходов со сравнимыми силами осцилляторов. Необходимое для возникновения обсуждаемой интерференции условие можно записать в виде неравенства:

$$\frac{1}{\Delta t} \geq \omega_{21}, \quad (9.75)$$

где $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$; $\omega_{1,2}$ — частоты оптических переходов $0 \rightarrow 1, 2$ соответственно; Δt — длительность лазерного импульса. В дальнейшем полагаем, что квантовая система включает в себя, по крайней мере, три энергетических уровня, связанных двумя оптическими переходами. Неравенство (9.75) обеспечивает когерентное возбуждение этих переходов лазерными импульсами. Таким образом, имеет место явление квантовой интерференции двух каналов фотонного эха, связанных с переходами $0 \rightarrow 1, 2$. Данная интерференция, как это будет показано ниже, приводит к биениям в сигнале фотонного эха на разностной частоте ω_{21} .

Поскольку в реальных ситуациях для выполнения условия (9.75) длительность возбуждающих импульсов лежит в фемтосекундном диапазоне, данную разновидность фотонного эха будем называть *фемтосекундным фотонным эхом*.

Рассмотрим экспериментально изученную ситуацию, когда квантовая система представляет собой полупроводниковый нанокристалл, в котором фемтосекундными импульсами возбуждаются квантово-размерные экситоны. Термин «квантово-размерные» означает, что частоты экситонных переходов даются следующей зависимостью:

$$\omega_j \approx \omega_G + \frac{\xi_j}{r^2}, \quad (9.76)$$

где ω_G — частота, соответствующая переходу между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости в объемном образце; r — размер нанокристалла; ξ_j — коэффициенты, зависящие от конкрет-

ных параметров нанокристалла. Отметим, что характерный размер нанокристалла в рассматриваемом случае составляет несколько нанометров.

Из формулы (9.76) видно, что разброс в размерах нанокристаллов приводит к неоднородному уширению линии оптического перехода, которое необходимо для реализации фотонного эха [см. условие (9.65)].

Рассматриваемый интерференционный эффект имеет наибольшую величину для переходов с близкими силами осцилляторов. Данному условию для нанокристалла CdSe в наибольшей степени соответствуют переходы: $1S_{3/2} - 1S_e$ (1) и $1P_{3/2} - 1P_e$ (2). Частоты этих переходов (за вычетом частоты ω_G) могут быть в первом приближении аппроксимированы следующими зависимостями:

$$\begin{aligned}\omega_1(r) &= \frac{2,81}{r^2} + 0,026 \text{ (эВ)}, & 4 \text{ нм} > r > 2 \text{ нм}; \\ \omega_2(r) &= \frac{4,44}{r^2} + 0,159 \text{ (эВ)}, & 3 \text{ нм} > r > 2 \text{ нм}; \\ \omega_3(r) &= \frac{5,66}{r^2} + 0,024 \text{ (эВ)}, & 4 \text{ нм} > r > 3 \text{ нм}.\end{aligned}\tag{9.77}$$

Радиус нанокристалла в формулах (9.77) выражен в нанометрах.

В случае фотонного эха на полупроводниковых нанокристаллах ситуация осложняется наличием сильной электрон-вибронной связи, в результате чего временная зависимость сигнала эха, вообще говоря, промодулирована с частотой вибронного колебания Ω_v . В результате выражение для временной зависимости сигнала трехимпульсного фотонного эха оказывается весьма громоздким, и мы его здесь не приводим. Отметим, что в это выражение входят временные интервалы между возбуждающими импульсами, оптические параметры нанокристалла, включая силы осцилляторов переходов и времена релаксации, а также вибронная частота Ω_v . Кроме того, эхосигнал зависит от типа распределения нанокристаллов по размеру и температуры образца.

На рис. 9.6 представлены квантовые биения сигнала трехимпульсного фотонного эха в нанокристалле CdSe среднего размера 2,5 нм при температуре $T = 15^\circ\text{K}$, вычисленные для различных значений временного интервала между вторым и третьим возбуждающими

импульсами с учетом сильной электрон-вибронной связи. Эти квантовые биения вызваны интерференцией экситонных переходов: $1S_{3/2} - 1S_e$ и $1P_{3/2} - 1P_e$ в нанокристалле, одновременно возбуждаемых лазерными импульсами фемтосекундной длительности. Силы осцилляторов этих переходов близки по величине, что оптимально для возникновения квантовой интерференции. Спектральная ширина возбуждающих лазерных импульсов (в энергетических единицах) составляет около 0,4 эВ. По оси ординат отложен логарифм эхо-сигнала, по оси абсцисс временной интервал между первыми двумя возбуждающими импульсами $t = t_{12}$ (в фемтосекундах).

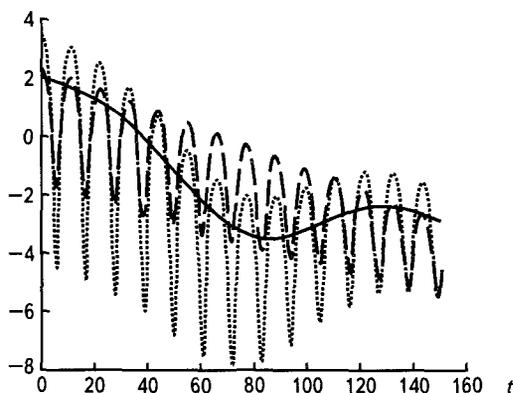


Рис. 9.6. Квантовые биения в сигнале трехимпульсного фотонного эха в нанокристалле CdSe среднего размера 2,5 нм с учетом интерференции переходов: $1S_{3/2} - 1S_e$ и $1P_{3/2} - 1P_e$ при $T = 15$ К для различной величины временного интервала между вторым и третьим возбуждающими импульсами (см. текст)

Сплошная кривая соответствует значению временной задержки между вторым и третьим импульсом $t_{23} = \pi/\omega_{21}$, в этом случае квантовые биения на частоте ω_{21} отсутствуют — остается «вибрационное» квантовое биение с периодом $2\pi/\Omega_v$. Точечная кривая отвечает противоположному случаю, когда $t_{23} = 2\pi/\omega_{21}$, и амплитуда биений на разностной частоте ω_{21} максимальна. Пунктирная кривая соответствует случаю, когда $t_{13} = 2\pi/\Omega_v$, и отсутствуют «вибрационные» биения. На рисунке заметно уменьшение амплитуды биений на частоте ω_{21} , вызванное дисперсией этого параметра $\delta\omega_{21}$. Период биений $T_{21} = 2\pi/\omega_{21}$ примерно равен 11 фс, а максимальное время биений

ний $T_{\max} \approx 4 \ln 2 / \delta\omega_{21}$ — порядка 280 фс (в случае гауссова распределения размеров нанокристаллов в образце). Заметим, что вибрационная частота Ω_v в данном случае составляет 160 фс, а время продольной релаксации $T_1 \geq 540$ фс. Время поперечной релаксации T_2 зависит от температуры образца, типа и размера нанокристалла, в рассматриваемых условиях оно превышает 120 фс. Для больших средних размеров нанокристаллов частота биений будет меньше, поскольку тогда уменьшается разностная частота экситонных переходов.

Таким образом, из рис. 9.6 следует, что характер квантовых биений в сигнале трехимпульсного фемтосекундного эха, вызванных интерференцией вкладов различных экситонных переходов, существенно зависит от временного интервала между возбуждающими лазерными импульсами. Это дает возможность использовать данную эхо-методику для определения параметров нанокристаллов. В частности, частота и время затухания квантовых биений в сигнале эха могут служить мерой величины среднего размера нанокристалла и его дисперсии.

На рис. 9.7 приведены расчетные значения сигнала трехимпульсного фотонного эха на нанокристалле большего радиуса (3 нм).

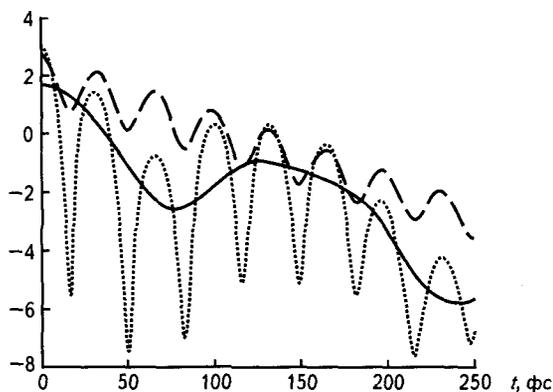


Рис. 9.7. Квантовые биения в нанокристалле $\text{CdS}_{0.23}\text{Se}_{0.73}$ среднего радиуса 3 нм при температуре $T = 15^\circ\text{K}$ (см. текст)

Как видно из сравнения рис. 9.6 и рис. 9.7, частота квантовых биений в сигнале трехимпульсного фотонного эха, вызванных одновременным возбуждением двух экситонных переходов, уменьшается с ростом размера нанокристалла.

На рис. 9.8 представлена зависимость интенсивности двухимпульсного эха в максимуме от временной задержки между возбуждающими лазерными импульсами для двух средних радиусов нанокристаллов в образце: 2 нм и 4 нм. В первом случае интерференционные биения имеют большую частоту и быстрее затухают по сравнению со вторым. Это объясняется ростом экситонных частот с уменьшением размера нанокристалла [см. формулу (9.77)], что, в частности, приводит к росту разности этих частот для различных переходов и их дисперсии.

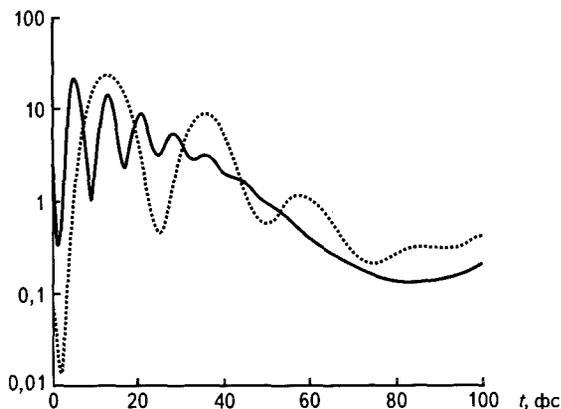


Рис. 9.8. Зависимость интенсивности сигнала двухимпульсного фотонного эха в максимуме от временной задержки между возбуждающими импульсами при одновременном возбуждении двух экситонных переходов в полупроводниковых нанокристаллах CdSe.

Сплошная кривая — средний радиус нанокристалла 2 нм; *пунктирная* — средний радиус нанокристалла 4 нм

9.5. ФАЗОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ФОТОВОЗБУЖДЕНИИ ВЕЩЕСТВА МОЩНЫМИ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ИМПУЛЬСАМИ

Рассмотрим фазовые эффекты на примере взаимодействия излучения с двухуровневой системой, которые обусловлены когерентностью этого взаимодействия [5]. Здесь под фазовыми эффектами понимается зависимость фотоотклика вещества от фазовых параметров возбуждающего электромагнитного поля. Когерентность взаимо-

действия предполагает, что на рассматриваемых временах не происходит возмущения двухуровневой системы термостатом.

При воздействии ультракоротких импульсов излучения на двухуровневую систему (при выполнении соотношения $\Delta t \approx 1/\omega$, Δt — длительность импульса, ω — его несущая частота) приближение вращающейся волны, использовавшееся в разд. 6.6, может оказаться неадекватным. В этом случае спектральная ширина излучения порядка несущей частоты, поэтому, строго говоря, не удовлетворяется резонансное условие (6.54), и пренебрежение влиянием встречной волны становится некорректным. Тогда необходимо исходить из точного векторного уравнения (9.15), которое в электрическом поле гауссовой формы (6.100) эквивалентно следующей системе, записанной в безразмерных переменных:

$$\begin{cases} \dot{R}_1 = R_2; \\ \dot{R}_2 = -R_1 + 2\xi \exp\left(-\frac{\tau^2}{\eta^2}\right) \cos(r\tau + \varphi_0) R_3; \\ \dot{R}_3 = -2\xi \exp\left(-\frac{\tau^2}{\eta^2}\right) \cos(r\tau + \varphi_0) R_2, \end{cases} \quad (9.78)$$

где точка обозначает дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_0 t$;

$$\xi = \frac{d_0 E_0}{\hbar \omega_0}; \quad \eta = \omega_0 \Delta t; \quad r = \frac{\omega}{\omega_0};$$

φ_0 — фаза несущей по отношению к огибающей импульса (CE (carrier-envelope) фаза).

Система уравнений (9.78) справедлива для времен, меньших времени продольной и поперечной релаксации (подразумевается, что длительность импульса достаточно мала $\Delta t \ll T_{1,2}$). Обобщение на случай больших времен не представляет затруднений, но удлинит запись формул. Система дифференциальных уравнений (9.78) не имеет в общем случае аналитического решения, но легко решается численно.

Если исключить вторую компоненту вектора Блоха из системы (9.78), то можно получить уравнение, левая часть которого совпадает с уравнением для гармонического осциллятора:

$$\ddot{R}_1 + R_1 = 2\xi R_3 \ddot{E}, \quad (9.79)$$

где $\vec{E} = E/E_0$ — нормированная на амплитуду напряженность электрического поля. Сравнивая равенство (9.79) с уравнением (1.75), видим, что в данном случае роль константы силы связи между полем и двухуровневой системой играет величина $\gamma = 2\xi R_3$ или (с учетом определения третьей компоненты вектора Блоха) $\gamma = 2\xi(N_1 - N_2)$.

Таким образом, связь с полем отсутствует, если населенности верхнего и нижнего уровней равны между собой. Любопытно, что это имеет место для когерентного состояния, когда собственный дипольный момент двухуровневой системы максимален.

При слабом возбуждении первоначально невозбужденной двухуровневой системы в нулевом приближении можно считать $N_2 \ll 1$, $N_1 \approx 1$, тогда $\gamma \approx 2\xi$, и формула (9.79) преобразуется в уравнение для гармонического осциллятора. Отличие будет заключаться в том, что в правой его части можно выделить силу осциллятора, учитывающую квантовый характер задачи.

Таким образом, в пределе теории возмущений, когда электрон-фотонная связь слабая $\xi < 0,1$, фазовые зависимости возбуждения двухуровневой системы описываются тем же коэффициентом модуляции (1.38), что и в случае гармонического осциллятора.

Система уравнений (9.78) для заданного типа возбуждения имеет универсальный характер, поскольку описывает эволюцию произвольной двухуровневой системы, связанной дипольно разрешенным переходом, под действием электрического поля гауссовой формы (6.100).

Возбуждение двухуровневой системы, первоначально находившейся на энергетическом уровне с меньшей энергией, можно характеризовать величиной населенности верхнего уровня энергии N_2 после завершения импульса электрического поля. Эта населенность связана простым соотношением с третьей компонентой вектора Блоха:

$$N_2 = \frac{1 - R_3}{2}. \quad (9.80)$$

При выводе (9.80) были использованы равенство (9.6) и условие нормировки $N_1 + N_2 = 1$. Таким образом, численно определяя R_3 из системы (9.78), можно по формуле (9.80) найти населенность верхнего уровня двухуровневой системы в произвольный момент времени.

На рис. 9.9 представлены временные зависимости населенности верхнего уровня двухуровневой системы для различных значений SE-фазы: $\varphi_0 = \pi/5, \pi/2$. Первоначально невозбужденная система возбуждалась импульсом с длительностью $\eta = 6$ при большой вели-

чине параметра силы связи $\xi = 3$. Видно, что для меньшей величины SE-фазы асимптотическое значение населенности верхнего уровня весьма велико $N_2(\tau \gg \eta) \approx 0,76$. В то же время для $\varphi_0 = \pi/2$ двухуровневая система после воздействия импульса остается практически невозбужденной $N_2(\tau \gg \eta) \approx 0,05$.

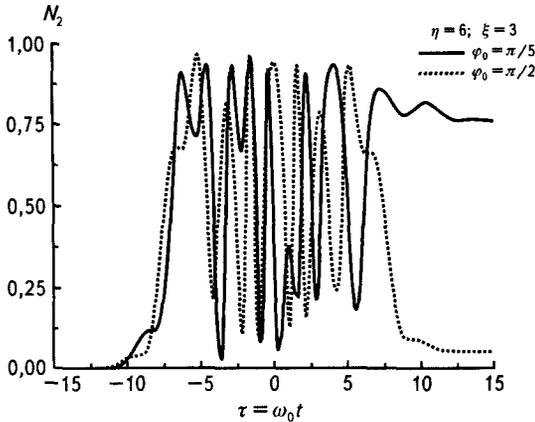


Рис. 9.9. Временная зависимость населенности верхнего уровня двухуровневой системы для различных значений SE-фазы возбуждающего импульса $\eta = 6$, $\xi = 3$, $r = 1$

Таким образом, при данных значениях параметров имеет место эффективный *фазовый контроль* возбуждения двухуровневой системы за счет изменения SE-фазы импульса электрического поля гауссовой формы (6.100).

Сильные осцилляции населенности в течение импульса представляют собой оптическую нутацию двухуровневой системы, о которой говорилось выше в связи с геометрической интерпретацией эволюции двухуровневой системы с помощью вектора Блоха.

Расчет показывает, что для меньшей силы связи $\xi = 1$ и тех же значений остальных величин, характеризующих излучение и двухуровневую систему, асимптотические населенности верхнего уровня для $\varphi_0 = \pi/5$, $\pi/2$ практически совпадают.

Приведем численные оценки параметров задачи для случая, когда двухуровневая система описывает переход ($5s-5p$) в атоме рубидия, сила осциллятора которого f_0 близка к единице. Тогда энергия перехода $\hbar\omega_0 = 1,85$ эВ, длительность импульса для величины без-

размерного параметра $\eta = 6$ равна $\Delta t_p \cong 3$ фс. Значение силы связи $\xi = 3$ соответствует интенсивности электромагнитного излучения на частоте ω_0 , равной $I = 4,3 \cdot 10^{15}$ Вт/см², что примерно на порядок меньше атомной интенсивности.

На рис. 9.10 представлена зависимость асимптотического значения населенности верхнего уровня двухуровневой системы, возбужденной полуцикловым импульсом при различных значениях параметра связи. Под полуцикловым понимается импульс с длительностью, равной половине периода на несущей частоте излучения.

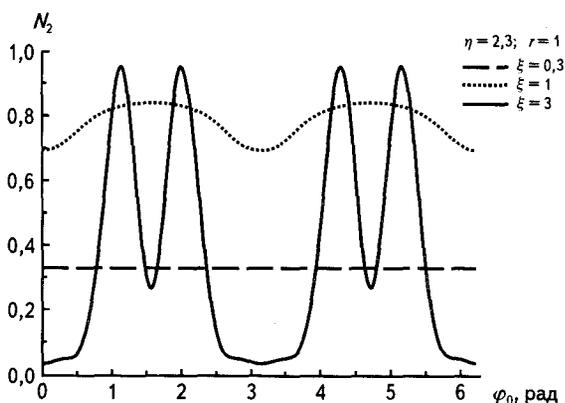


Рис. 9.10. Фазовая зависимость населенности верхнего уровня двухуровневой системы для $\tau \gg \eta$, возбужденной полуцикловым импульсом ($\eta = 2,3$), при различных значениях параметра связи: $\xi = 0,3; 1; 3$

Из рис. 9.10 следует, что заметная фазовая модуляция населенности наблюдается только в сильно нелинейном режиме даже для ультракороткого импульса электрического поля. В линейном режиме $\xi < 0,1$ коэффициент модуляции (1.38) для приведенных на рис. 9.10 значений параметров равен: $K = 0,01$. Отметим, что в линейном режиме он не зависит от силы связи между полем и двухуровневой системой.

После окончания действия импульса электрического поля дипольный момент двухуровневой системы на временах, меньших времени поперечной релаксации, будет осциллировать на собственной частоте ω_0 , вызывая тем самым излучение электромагнитных волн. Мощность этого излучения Q в дипольном приближении описывается формулой (1.51). Для характеристики ее зависимости от

СЕ-фазы можно ввести величину, аналогичную коэффициенту модуляции для гармонического осциллятора (1.38):

$$K_\varphi = \frac{Q(\varphi_0 = 0) - Q(\varphi_0 = \pi/2)}{Q(\varphi_0 = 0) + Q(\varphi_0 = \pi/2)}, \quad (9.81)$$

где

$$Q(t \gg \Delta t, \varphi_0) \equiv \frac{2\omega_0^4 d_{\text{amp}}^2 (t \gg \Delta t, \varphi_0)}{3c^3}; \quad (9.82)$$

$$d_{\text{amp}}^2 (t \gg \Delta t, \varphi_0) \equiv 4d_0^2 N_2 (t \gg \Delta t, \varphi_0) [1 - N_2 (t \gg \Delta t, \varphi_0)]. \quad (9.83)$$

При выводе последнего равенства использованы формула

$$d(t) = d_0 \sqrt{1 - R_3^2} \cos(\omega_0 t + \varphi_0)$$

и выражение (9.80).

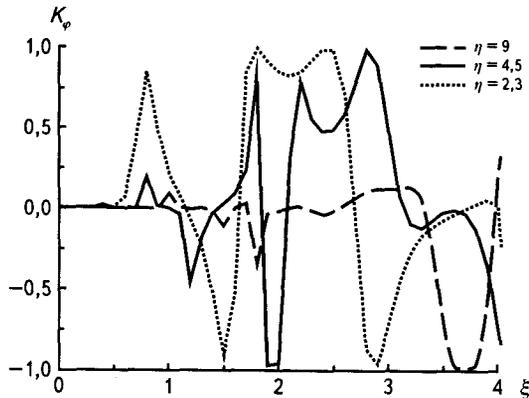


Рис. 9.11. Зависимость коэффициента фазовой модуляции мощности излучения двухуровневой системы после окончания возбуждающего импульса от параметра силы поля для различных длительностей импульса

Расчетные зависимости коэффициента фазовой модуляции (9.81) по окончании действия электрического поля от параметра силы поля t для различных длительностей импульса, соответствующих возбуждению двухуровневой системы полу-, одно- и двухцикловым импульсом, представлены на рис. 9.11.

Из рис. 9.11 следует, что зависимость коэффициента фазовой модуляции от параметра силы связи t носит нерегулярный характер. Величина K_φ изменяется в интервале от -1 до 1 в отличие от коэффициента модуляции гармонического осциллятора (1.37), который всегда больше нуля и меньше единицы. Существенно, что в области сильной нелинейности ($\xi > 1$) мощность излучения зависит от СЕ-фазы даже для относительно больших длительностей импульса поля $\eta \geq 9$.

Напомним, что в гармоническом приближении коэффициент фазовой модуляции имеет заметную величину только для субцикловых импульсов $\eta < 4$ (см. рис. 1.3). Из рис. 9.11 видно также, что зависимость $K_\varphi(\xi)$ имеет широкие интервалы изменения аргумента, в которых $|K_\varphi| \geq 0,5$, т. е. фазовая зависимость мощности излучения в принципе может быть наблюдаема. С ростом длительности импульса электрического поля широкие максимумы кривых рис. 9.11 сдвигаются в область больших значений параметра силы связи ξ . Так, например, для двухциклового импульса ($\eta = 9$) обсуждаемый максимум начинается при $\xi > 3,3$.

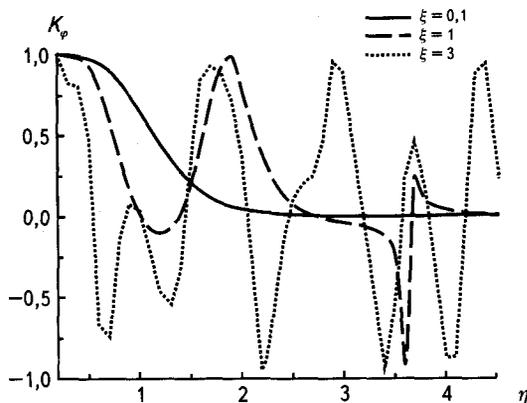


Рис. 9.12. Зависимость коэффициента фазовой модуляции мощности излучения двухуровневой системы от длительности импульса электрического поля после его окончания

Однако нужно иметь, в виду, что в реальных квантовых системах при большой величине параметра ξ велика вероятность туннельной ионизации системы. В результате помимо фотовозбуждения нужно, вообще говоря, учитывать возможность разрушения

двух-уровневой системы вследствие туннельной ионизации, если ξ достаточно велико.

Так, рис. 9.12 характеризует фазовую чувствительность мощности излучения двухуровневой системы как функцию безразмерной длительности импульса η для различных величин параметра силы связи ξ . Видно, что для малой величины параметра силы связи $\xi = 0,1$, когда работает линейное приближение, график функции $K_\varphi(\eta)$ совпадает с аналогичной зависимостью, приведенной на рис. 1.3 ($r = 1$) для гармонического осциллятора.

Анализ показывает, что заметное отличие зависимости коэффициента модуляции от гармонического приближения возникает в области $\xi \geq 0,4$, когда у функции $K_\varphi(\eta)$ появляется максимум при $\eta_{\max}(\xi = 0,5) \cong 3,5$, равный $0,14$. С ростом параметра силы связи величина максимума увеличивается, а его положение сдвигается в область меньших длительностей импульса. Так, при $\xi = 0,6$ расчет дает $K_\varphi(\eta_{\max} \cong 2,95) \cong 0,39$.

Таким образом, квантовое описание двухуровневой системы в рамках формализма вектора Блоха позволяет расширить границы исследования фазовых эффектов при возбуждении вещества сверхкороткими импульсами на область больших значений параметра силы связи с полем, где не работает гармоническое приближение и теория возмущений. При этом оказывается, что фазовая чувствительность возбуждения двухуровневой системы может сохраняться и для мультицикловых импульсов, если $\xi > 1$.

Литература

1. Клышко Д.Н. Физические основы квантовой электроники. М.: Наука 1986. 294 с.
2. Белоусов Ю.М., Манько В.И. Матрица плотности (представления и применения в статистической механике). Часть 1. М.: МФТИ, 2004. 163 с.
3. Астапенко В.А., Фомичев А.А. Когерентные процессы и интерференционные эффекты в лазерной физике. М.: МФТИ, 2003. 104 с.
4. Astapenko V., Yakshin M. Photon echo in CdSe nanocrystals at simultaneous excitation of several exciton levels. *Laser Physics*, 1996, V. 6, № 4, pp.739—743.
5. Arustamyan M.G., Astapenko V.A. Phase control of two-level system excitation by short laser pulses. *Laser Physics*, 2008, V. 18, № 6, pp.768—773.

10.1. ДВУХФОТОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Данная глава посвящена радиационным явлениям в электромагнитном излучении, состоящем из двух монохроматических компонент. Напряженность электрического поля в таком излучении дается выражением:

$$E(t) = E_{01} \cos(\omega_1 t + \varphi_{01}) + E_{02} \cos(\omega_2 t + \varphi_{02}), \quad (10.1)$$

где $E_{01, 02}$ — амплитуды монохроматических компонент; $\omega_{1, 2}$ — их частоты; $\varphi_{01, 02}$ — начальные фазы. Электромагнитное поле типа (10.1) называется *бихроматическим*.

Рассмотрим сначала ситуацию, когда отношение частот ω_1 и ω_2 является произвольным числом. Пользуясь теорией возмущений, нетрудно обобщить результаты разд. 6.5 для вероятностей двухфотонных процессов на бихроматический случай. С этой целью в формулу (6.32) нужно подставить матричные элементы оператора бихроматического возмущения вида:

$$V_{kn}(t) = \tilde{V}_{1kn} e^{-i\omega_1 t} + \tilde{V}_{1kn}^* e^{i\omega_1 t} + \tilde{V}_{2kn} e^{-i\omega_2 t} + \tilde{V}_{2kn}^* e^{i\omega_2 t}, \quad (10.2)$$

где \tilde{V}_{jkn} — матричные элементы электромагнитного взаимодействия для j -й монохроматической компоненты с выделенной временной зависимостью,

$$\tilde{V}_{jkn} = \frac{1}{2} d_{kn} E_{0j} e^{-i\varphi_{0j}}. \quad (10.3)$$

Равенство (10.3) соответствует использованию дипольного приближения (1.4), справедливого для не слишком коротких длин волн излучения. В противном случае в (10.3) необходимо учитывать зависимость напряженности электрического поля от пространственной координаты.

После указанной подстановки для амплитуды двухфотонного поглощения под влиянием *обеих* монохроматических компонент записать следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 A_{fi}^{(2abs)} &= \frac{1}{\hbar} \left\{ \langle f | \hat{V}_2 G(E_i + \hbar\omega_1) \hat{V}_1 | i \rangle + \langle f | \hat{V}_1 G(E_i + \hbar\omega_2) \hat{V}_2 | i \rangle \right\} = \\
 &= \sum_n \left\{ \frac{\tilde{V}_{2fn} \tilde{V}_{1ni}}{\hbar^2 (\omega_{ni} - \omega_1 - i\gamma_{ni})} + \frac{\tilde{V}_{1fn} \tilde{V}_{2ni}}{\hbar^2 (\omega_{ni} - \omega_2 - i\gamma_{ni})} \right\}. \quad (10.4)
 \end{aligned}$$

Отметим, что в этой формуле присутствуют два слагаемых в отличие от амплитуды (6.40) монохроматического двухфотонного поглощения. Для вероятности рассматриваемого процесса имеем:

$$w_{fi}^{(2abs)} = 2\pi G_{fi} (\omega_1 + \omega_2) \left| A_{fi}^{(2abs)} \right|^2. \quad (10.5)$$

Амплитуда и вероятность вынужденного двухфотонного излучения под действием *обеих* компонент бихроматического поля получаются из формул (10.4) и (10.5) путем изменения знака у частот и комплексного сопряжения матричных элементов оператора взаимодействия. В результате находим:

$$A_{fi}^{(2em)} = \sum_n \left\{ \frac{\tilde{V}_{2fn}^* \tilde{V}_{1ni}^*}{\hbar^2 (\omega_{ni} + \omega_1 - i\gamma_{ni})} + \frac{\tilde{V}_{1fn}^* \tilde{V}_{2ni}^*}{\hbar^2 (\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni})} \right\}; \quad (10.6)$$

$$w_{fi}^{(2em)} = 2\pi G_{fi} (-\omega_1 - \omega_2) \left| A_{fi}^{(2em)} \right|^2. \quad (10.7)$$

Здесь аргумент в функции формы линии соответствует закону сохранения энергии в виде $E_i = E_f + \hbar(\omega_1 + \omega_2)$ (с точностью до энергетической ширины линии перехода $\hbar\gamma_{fi}$). Таким образом, в данном случае предполагается, что $E_i > E_f$.

Для вынужденного рассеяния, если выполняется приближенное равенство $\omega_{fi} \approx \omega_1 - \omega_2$, формулы для амплитуды и вероятности процесса имеют вид:

$$A_{fi}^{(\text{scat})} = \sum_n \left\{ \frac{\tilde{V}_{2fn}^* \tilde{V}_{1ni}}{\hbar^2 (\omega_{ni} - \omega_1 - i\gamma_{ni})} + \frac{\tilde{V}_{1fn} \tilde{V}_{2ni}^*}{\hbar^2 (\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni})} \right\}; \quad (10.8)$$

$$w_{fi}^{(\text{scat})} = 2\pi G_{fi} (\omega_1 - \omega_2) \left| A_{fi}^{(\text{scat})} \right|^2. \quad (10.9)$$

Если же $\omega_{fi} \approx \omega_2 - \omega_1$, то в (10.8) и (10.9) следует произвести замену индекса у частоты $1 \leftrightarrow 2$.

Рассеяние, при котором $\omega_{fi} \neq 0$ и соответственно $\omega_1 \neq \omega_2$, называется *вынужденным комбинационным рассеянием*. В ходе комбинационного рассеяния частота излучения изменяется в отличие от рэлеевского рассеяния, происходящего без изменения частоты.

Представляет интерес рассмотреть спонтанное двухфотонное излучение разных частот. Для этого запишем вероятность вынужденного процесса в виде:

$$w_{fi}^{(2em)} = \frac{(2\pi)^3 u_1 u_2}{\hbar^2} G_{fi} (-\omega_1 - \omega_2) \times \\ \times \left| \frac{1}{\hbar} \sum_n \frac{(\mathbf{e}_2^* \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e}_1^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega_1 - i\gamma_{ni}} + \frac{(\mathbf{e}_1^* \mathbf{d}_{fn})(\mathbf{e}_2^* \mathbf{d}_{ni})}{\omega_{ni} + \omega_2 - i\gamma_{ni}} \right|^2, \quad (10.10)$$

где $u_{1,2}$ — пространственные плотности энергии монохроматических компонент поля (10.1).

Поскольку спонтанные радиационные явления вызываются электромагнитным полем вакуумных флуктуаций, для перехода к спонтанному процессу в (10.10) нужно произвести замены, аналогичные (8.28):

$$u_j \rightarrow du_{\text{vac}}(j) = \frac{\hbar(\omega_j)^3}{8\pi^3 c^3} d\omega_j d\Omega_j, \quad j = 1, 2, \quad (10.11)$$

а затем просуммировать по конечным состояниям системы. Это суммирование сводится к интегрированию по частотам ω_j , суммирова-

нию по поляризациям e_j и интегрированию по телесным углам испускания двух фотонов Ω . Так как спектр вакуумных флуктуаций электромагнитного поля бесконечно широкий, то при выполнении интегрирования по частотам удобно функцию формы линии в (10.10) заменить на дельта-функцию. Пусть для простоты начальное и конечное состояния квантовой системы сферически симметричны, а вектора поляризаций e_j действительны (линейная поляризация). Тогда квадрат модуля в правой части равенства (10.10) может быть записан в следующем виде:

$$(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 |c_{fi}(\omega_2, -\omega_1)|^2,$$

где $c_{fi}(\omega', \omega)$ — скалярная часть тензора рассеяния (8.31). Суммирование по поляризациям (с помощью правила усреднения компонент единичных векторов $e_j \langle e^l e^s \rangle = (\delta^{ls} - n^l n^s)/2$) и интегрирование по телесным углам приводит к замене:

$$(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2)^2 \rightarrow 32\pi^2.$$

В результате для вероятности в единицу времени спонтанного двухфотонного излучения получаем

$$w_{fi}^{(2em)} = \frac{4}{\pi c^6} \int_0^{\omega_f} \omega_1^3 (\omega_f - \omega_1)^3 |c_{fi}(\omega_f - \omega_1, -\omega_1)|^2 d\omega_1, \quad (10.12)$$

где

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar} > 0;$$

c — скорость света. При выводе (10.12) было учтено, что из-за наличия дельта-функции в интеграле по $d\omega_2$ [была сделана замена $G_{fi}(\omega) \rightarrow \delta(\omega)$] величина ω_2 фиксируется, если частота ω_1 задана: $\omega_2 = \omega_f - \omega_1$.

Вероятность двухфотонного спонтанного излучения (10.12) содержит множитель c^{-6} в отличие от однофотонного процесса, в вероятность которого входит c^{-3} . В атомных единицах $c \cong 137$, $c^{-3} \cong 3,9 \cdot 10^{-7}$ и $c^{-6} \cong 1,5 \cdot 10^{-13}$. Тем самым определяется малость двухфотонной вероятности по сравнению с однофотонной.

Выражение (10.12) описывает, в частности, распад $2s$ подуровня атома водорода в результате двухфотонного перехода $2s \cong 1s$. Дей-

ствительно, однофотонный процесс $2s \cong 1s$ запрещен правилами отбора по четности, так что остаются возможными только переходы с излучением четного числа фотонов, из которых основной вклад дает двухфотонное излучение. Вероятность четырехфотонного распада, например, содержит малый множитель c^{-12} .

Вычисление вероятности в единицу времени (10.10) может быть проведено с помощью формализма кулоновской функции Грина, которая определяет величину $c_{fi}(\omega', \omega)$. В результате получается следующее значение для времени жизни $2s$ подуровня атома водорода:

$$\tau_{2s} = \frac{1}{w_{2s1s}^{(2em)}} \approx 0,14 \text{ с.} \quad (10.13)$$

Расчетный результат (10.13) находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Приведем для сравнения время жизни $2p$ подуровня атома водорода, который распадается за счет однофотонного перехода: $\tau_{2p} \cong 1,6 \cdot 10^{-9}$ с. Итак, в данном случае двухфотонный процесс на целых восемь порядков величины менее вероятен, чем однофотонный.

10.2. ФАЗОВЫЙ КОНТРОЛЬ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Рассмотрим радиационные явления в бихроматическом излучении с кратными частотами, в котором напряженность электрического поля равна:

$$E(t) = E_{01} \cos(\omega t + \varphi_{01}) + E_{0n} \cos(n\omega t + \varphi_{0n}), \quad (10.14)$$

где n — целое число, большее единицы. В дальнейшем предполагается, что начальные фазы монохроматических компонент $\varphi_{01}, \varphi_{0n}$ могут изменяться контролируемым образом.

Квантовая система под действием поля (10.14) может совершить переход из начального состояния в конечное состояние по двум каналам, как это показано на рис. 10.1 для $n = 3$, т. е. когда бихроматическое поле является суперпозицией поля на основной частоте и его третьей гармоники. В этом случае первый канал представляет собой однофотонное поглощение на частоте третьей гармоники с амплитудой $A_{ji}^{(1)}$, а второй — трехфотонное поглощение на основной

частоте с амплитудой $A_{fi}^{(n=3)}$. Предполагаем выполненными условия применимости теории возмущений. Полная амплитуда процесса при двухканальном возбуждении равна:

$$A_{fi}^{(\text{tot})} = A_{fi}^{(1)} + A_{fi}^{(n)}.$$

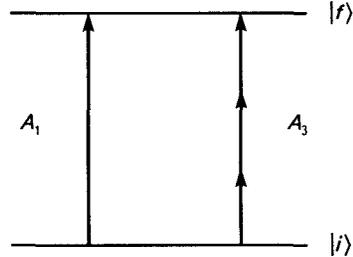


Рис. 10.1. Два канала перехода системы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ с амплитудами $A_1 \equiv A_{fi}^{(1)}$ и $A_3 \equiv A_{fi}^{(n=3)}$, возбуждаемых бихроматическим излучением с кратными частотами

Для полной вероятности в единицу времени бихроматического возбуждения перехода $i \rightarrow f$ имеем (при произвольном n):

$$\begin{aligned} w_{fi}^{(\text{bh})} &= 2\pi G_{fi}(n\omega) \left| A_{fi}^{(1)} + A_{fi}^{(n)} \right|^2 = \\ &= 2\pi G_{fi}(n\omega) \left\{ \left| A_{fi}^{(1)} \right|^2 + \left| A_{fi}^{(n)} \right|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[A_{fi}^{(1)} \left(A_{fi}^{(n)} \right)^* \right] \right\}. \end{aligned} \quad (10.15)$$

Здесь первое слагаемое в фигурных скобках описывает однофотонное поглощение на частоте n -й гармоники, второе слагаемое описывает n -фотонное поглощение на основной частоте, а третье слагаемое представляет себя интерференционный член. Если учесть общее выражение для амплитуды n -фотонного поглощения (6.48), то (10.15) можно переписать в виде:

$$w_{fi}^{(\text{bh})} = w_{fi}^{(1\text{abs})} + w_{fi}^{(n\text{abs})} + 2\pi G_{fi}(n\omega) \left| A_{fi}^{(1)} \right| \left| A_{fi}^{(n)} \right| \cos(\Delta\varphi_{\text{bh}} + \Delta\varphi_i), \quad (10.16)$$

где $\Delta\varphi_{\text{bh}}$ — величина, которую будем называть *бихроматической фазой*:

$$\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_{0n} - n\varphi_{01};$$

$\Delta\varphi_i$ — «внутренний» сдвиг фаз, не зависящий от начальных фаз монохроматических компонент поля (10.14),

$$\Delta\varphi_i = \arg\left(A_{fi}^{(1)}\right) - \arg\left(A_{fi}^{(n)}\right) - \Delta\varphi_{\text{bh}}.$$



Когда начальное и конечное состояния квантовой системы принадлежат дискретному энергетическому спектру и отсутствует промежуточный резонанс, то $\Delta\varphi_i = 0$.

Из выражения (10.16) следует, что изменение бихроматической фазы $\Delta\varphi_{bh}$ за счет наличия интерференционного члена приводит к изменению полной вероятности радиационного процесса при постоянных интенсивностях монохроматических компонент. Такое управление вероятностью фотопроцесса за счет изменения бихроматической фазы называется *когерентным фазовым контролем* в бихроматическом поле. Как следует из вышесказанного, физической основой когерентного фазового контроля является *квантовая интерференция амплитуд* двух каналов при бихроматическом воздействии.

Равенство (10.16) удобно представить в следующей форме:

$$w_{fi}^{(bh)} = w_{fi}^{(\Sigma)} \left\{ 1 + \frac{k}{2} \cos(\Delta\varphi_{bh} + \Delta\varphi_i) \right\}, \quad (10.17)$$

где $w_{fi}^{(\Sigma)}$ — вероятность процесса без интерференционного слагаемого,

$$w_{fi}^{(\Sigma)} = w_{fi}^{(labs)} + w_{fi}^{(nabs)};$$

k — выражение для *коэффициента фазовой модуляции* через амплитуды каналов,

$$k = 2 \sin \left\{ 2 \operatorname{arctg} \left[\frac{A_{fi}^{(nabs)}}{A_{fi}^{(labs)}} \right] \right\}. \quad (10.18)$$

Коэффициент фазовой модуляции определяется формулой:

$$k = 2 \frac{w_{\max} - w_{\min}}{w_{\max} + w_{\min}}, \quad (10.19)$$

где $w_{\max, \min}$ — максимальное и минимальное значения вероятности возбуждения в зависимости от величины бихроматической фазы $\Delta\varphi_{bh}$. Как следует из определения (10.19), коэффициент фазовой модуляции изменяется в пределах $2 \geq k \geq 0$. В случае $k = 2$ достигается максимально возможная фазовая модуляция процесса, если же $k = 0$, фазовая модуляция отсутствует.

В соответствии с равенством (10.18) можно сделать вывод о том, что максимально возможная фазовая модуляция бихроматического возбуждения отвечает условию:

$$\left| A_{fi}^{(nabs)} \right| = \left| A_{fi}^{(1abs)} \right|, \quad (10.20)$$

т. е. имеет место в случае, когда модули амплитуд двух каналов процесса равны между собой.

Рассмотрим бихроматическое возбуждение в простейшем случае *двухурвневой системы*, когда амплитуда n -фотонного поглощения дается формулой (6.50) и вычисления можно довести до конца. Используя эту формулу для однофотонного возбуждения на частоте n -й гармоники и n -фотонного возбуждения на основной частоте, находим выражение для вероятности в единицу времени бихроматического возбуждения:

$$w_{\text{TLS}}^{(\text{tot})} = 2\pi G(n\omega) \left| \Omega_{0n} + C_n \frac{\Omega_{01}^n}{\omega_0^{(n-1)}} \exp(i\Delta\varphi_{\text{bh}}) \right|^2, \quad (10.21)$$

где Ω_{0j} — резонансные частоты Раби двухурвневой системы, соответствующие амплитудам напряженности электрического поля E_{01} , E_{0n} ,

$$\Omega_{0j} = \frac{d_0 E_{0j}}{2\hbar}, \quad j = 0, n; \quad (10.22)$$

C_n — численный коэффициент, который дается равенством (6.52); ω_0 , d_0 — собственная частота и дипольный момент перехода двухурвневой системы.

После взятия квадрата модуля в правой части равенства (10.21) для полной вероятности в единицу времени (или скорости) бихроматического возбуждения двухурвневой системы находим:

$$w_{\text{TLS}}^{(\text{tot})}(\Delta\varphi_n) = w_n^{(\Sigma)} \left[1 + \frac{k}{2} \cos\left(\Delta\varphi_{\text{bh}} + \frac{\pi}{2}(n-1)\right) \right]. \quad (10.23)$$

Здесь $w_n^{(\Sigma)}$ — скорость бихроматического возбуждения двухурвневой системы без учета интерференционного слагаемого,

$$w_n^{(\Sigma)} = 2\pi G(n\omega) \left[\Omega_{0n}^2 + C_n^2 \omega_0^2 \left(\frac{\Omega_{01}}{\omega_0} \right)^{2n} \right]; \quad (10.24)$$

k_n — коэффициент фазовой модуляции вероятности бихроматического возбуждения двухуровневой системы,

$$k_n = 2 \sin \left\{ 2 \arctg \left[|C_n| \frac{\Omega_{01}^n}{\Omega_{0n} \omega_0^{(n-1)}} \right] \right\}. \quad (10.25)$$

Подчеркнем, что в случае четного числа n и вероятность рассматриваемого процесса *равна нулю* из-за дипольных правил отбора.

Соотношение (10.20) для бихроматического возбуждения двухуровневой системы переписывается в виде:

$$|C_n| \Omega_{01}^n = \Omega_{0n} \omega_0^{(n-1)}. \quad (10.26)$$

Равенство (10.26) определяет оптимальные параметры задачи, при которых коэффициент фазовой модуляции максимален $k_n = 2$. Поскольку на практике имеют дело с интенсивностью излучения, а не с напряженностью поля, есть смысл переписать условие (10.26) через интенсивность излучения на основной частоте

$$I_1 = c \frac{E_{01}^2}{8\pi}, \quad (10.27)$$

где c — скорость света, и параметр

$$\eta_n = \frac{I_n}{I_1}, \quad (10.28)$$

представляющий собой отношение интенсивности n -й гармоники и интенсивности излучения на основной частоте. Тогда равенство (10.26) дает:

$$\eta_n^{(\text{opt})} = C_n^2 \left(\frac{\Omega_{01}}{\omega_0} \right)^{(2n-2)} = C_n^2 \left(\frac{d_0}{2\hbar\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi I_1}{c}} \right)^{(2n-2)}. \quad (10.29)$$

В случае выполнения равенства $\eta_n = \eta_n^{(\text{opt})}$ коэффициент фазовой модуляции $k_n = 2$, т. е. максимален, и зависимость скорости возбуждения двухуровневой системы от бихроматической фазы наиболее сильная. Для проведения расчетов удобно переписать условие (10.29) в атомных единицах, когда $e = m = \hbar = 1$, и интенсивность излучения (в ваттах, деленных на квадратный сантиметр) должна быть

нормирована на величину атомной интенсивности, которая равна $I_a = 3,52 \cdot 10^{16}$ Вт/см². Тогда вместо (10.29) имеем:

$$\eta_n^{(\text{opt})} = C_n^2 \left(\frac{d_0}{2\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi I_1}{137 I_a}} \right)^{(2n-2)} \quad (10.30)$$

При записи (10.30) было учтено, что в атомных единицах скорость света равна 137.

В качестве примера реализации двухуровневой системы рассмотрим переходы из состояний с нулевым орбитальным моментом без изменения главного квантового числа в атоме рубидия (основное состояние $5s$). Такой выбор обусловлен тем обстоятельством, что сила осциллятора для переходов внутри атомной оболочки (без изменения главного квантового числа) максимальна. Поэтому в наилучшей степени выполняется условие двухуровневого приближения. Параметры двух таких переходов приведены в табл. 10.1 (тонкое расщепление энергетических уровней не учитывается).

Таблица 10.1. Параметры резонансных переходов в атоме рубидия

Переход	ω_0 , ат. ед.	f_0	d_0 , ат. ед.	λ_1 , мкм	$\zeta_1 = \frac{\Omega_{01}}{\omega_0}$
$5s \rightarrow 5p$	0,058	0,99	2,93	2,36	$2,53 E_{01}$
$6s \rightarrow 6p$	0,016	1,5	6,85	8,27	$214 E_{01}$

Зависимость коэффициента фазовой модуляции от интенсивности излучения на основной частоте для первого перехода из табл. 10.1 представлена на рис. 10.2 для $n = 3$.

Вычисления показывают, что оптимальные значения интенсивности излучения на основной частоте (при тех же величинах параметра $\eta_3 = I_3/I_1$) для перехода $6s \rightarrow 6p$ в атоме рубидия на два порядка величины меньше, чем для перехода из основного состояния. Это связано с большей величиной отношения

$$\zeta_1 = \frac{\Omega_{01}}{\omega_0}$$

(последний столбец табл. 10.1), определяющего амплитуду n -фотонного процесса [второе слагаемое под знаком модуля в правой части равенства (10.21)].

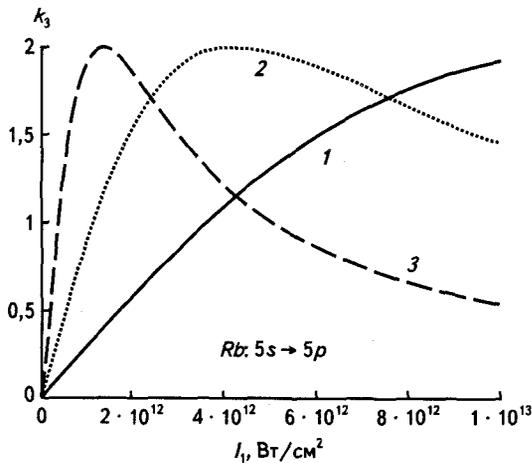


Рис. 10.2. Зависимость коэффициента фазовой модуляции скорости бихроматического возбуждения перехода $5s \rightarrow 5p$ в атоме рубидия, вычисленная в двухуровневом приближении, от интенсивности излучения на основной частоте I_1 при различных значениях параметра $\eta_3 = I_3/I_1$:
 1 — $\eta_3 = 10^{-2}$; 2 — $\eta_3 = 10^{-3}$; 3 — $\eta_3 = 10^{-4}$

Для относительно малых значений интенсивностей излучения формула (10.25) для коэффициента фазовой модуляции может быть переписана в виде:

$$k_n(I_1 \rightarrow 0) \rightarrow 4|C_n| \frac{\Omega_{01}^n}{\Omega_{0n} \omega_0^{n-1}} = 4|C_n| \eta_n^{-1/2} \left(\frac{d_0}{2\hbar\omega_0} \sqrt{\frac{8\pi}{c}} I_1 \right)^{(n-1)}, \quad (10.31)$$

т. е. имеет место предельное соотношение

$$k_n \rightarrow \eta_n^{-1/2} (I_1)^{(n-1)/2}.$$

Отсюда, в частности, следует, что при $n = 3$, коэффициент фазовой модуляции в области малых значений интенсивности излучения растет линейно с величиной I_1 , причем угол наклона соответствующей прямой к оси абсцисс увеличивается с уменьшением параметра $\eta_3 = I_3/I_1$:

$$k_3 \cong 0,4 \left(\frac{d_0}{\omega_0} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{\eta_3}} \frac{I_1}{I_a}. \quad (10.32)$$

В этой формуле использованы атомные единицы.

Полученные результаты могут быть использованы для оценки эффективности фазового контроля возбуждения атомов в дискретном спектре под действием бихроматического излучения с кратными частотами в случае применимости двухуровневого приближения и теории возмущений.

10.3. ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО ФАЗОВОМУ КОНТРОЛЮ

Подавляющая часть выполненных к настоящему времени экспериментов по фазовому контролю в бихроматическом поле посвящена возбуждению квантовых систем (атомов, молекул, твердых тел) из связанного состояния в состояние непрерывного спектра. Впервые когерентный контроль бихроматического возбуждения атома на связанно-связанном переходе при внешнем изменении бихроматической фазы наблюдался в работе Эллиота с сотрудниками в 1990 г. [1].

Возбуждался $6s^1S_0 \rightarrow 6p^1P_1$ переход в атоме ртути под действием излучения на основной частоте ($\lambda = 554$ нм) и его третьей гармоники. В этом случае имела место квантовая интерференция амплитуды однофотонного поглощения на частоте третьей гармоники и амплитуды трехфотонного поглощения излучения на основной частоте. Зависимость полной скорости возбуждения $6s^1S_0 \rightarrow 6p^1P_1$ перехода от бихроматической фазы $\Delta\varphi = \varphi_{03} - 3\varphi_{01}$ регистрировалась по сигналу фототока, возникающего в результате двухфотонной ионизации $6p^1P_1$ состояния излучением на основной частоте. Третья гармоника генерировалась сфокусированным излучением на основной частоте в камере с парами ртути 1 (рис. 10.3) при относительно высоком давлении (100 мТорр). Бихроматическая фаза варьировалась за счет пропускания излучения на основной частоте и его третьей гармоники через кювету 2 с аргоном переменного давления ($P_{Ar} = 0-38$ Торр) в соответствии с равенством:

$$\Delta\varphi = \frac{6\pi l \Delta\rho}{\lambda_1} [n(\lambda_1) - n(\lambda_3)], \quad (10.33)$$

где l — длина пути лазерного луча в кювете с аргоном; $\Delta\rho$ — изменение плотности аргона; $n(\lambda_j)$ — показатель преломления аргона на длине волны λ_j . Изменение давления аргона, необходимое для изменения бихроматической фазы на 2π радиан, в обсуждаемом эксперименте составляло примерно 6 Торр. Сигнал фототока возникал

в результате фокусировки бихроматического излучения зеркалами 4 с контролируемой разностью фаз $\Delta\varphi = \varphi_{03} - 3\varphi_{01}$ во второй камере с парами ртути 3 при низком давлении (2—3 мТорра). Низкое давление в регистрационной камере было необходимо, чтобы уменьшить вклад в процесс генерируемой в ней третьей гармоники. Фототок регистрировался с помощью коллектора, представлявшего собой пару платиновых пластин 5, на которые подавалось напряжение смещения. Энергия импульса излучения на основной частоте составляла 4,5 мДж при длительности 15 нс. Рассчитанный радиус лазерного луча в фокальной области равнялся примерно 20 мкм. Каждая экспериментальная точка в фазовой зависимости фототока была получена в результате усреднения данных по 60—80 лазерным импульсам. При этом допустимая флуктуация мощности лазерного излучения составляла $\pm 5\%$. Специальные меры были предприняты для стабильного перекрытия монохроматических компонент излучения в фокальной области и высокой пространственной когерентности лазерного излучения.

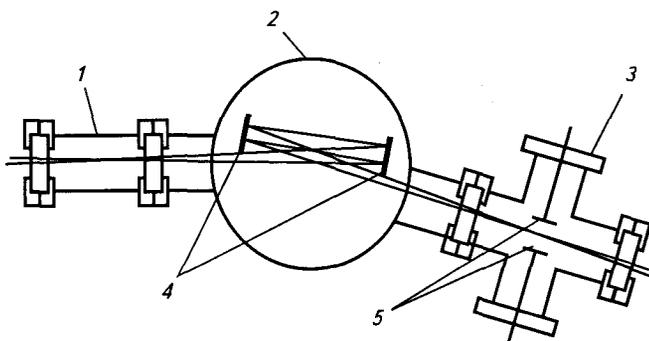


Рис. 10.3. Экспериментальная установка Эллиота с сотрудниками по наблюдению фазового контроля на связанно-связанном переходе

Зарегистрированная в эксперименте [1] глубина фазовой модуляции фототока, характеризующая эффективность когерентного фазового контроля, составила 15 % при максимально возможном расчетном значении 30 %. Ограничение на расчетную величину глубины фазовой модуляции проистекает из различной пространственной зависимости интенсивности излучения на основной частоте и его третьей гармоники в фокальной области. Отклонение измеренного значения данной величины от расчетного авторы связывали с влиянием ряда факторов, таких как: несовершенное перекрытие ла-

зерных пучков, неоптимальное отношение вероятностей одно- и трехфотонного поглощения, эффект насыщения и сдвиг верхнего энергетического уровня вследствие динамического эффекта Штарка.

Иная схема возбуждения атомов в дискретном спектре использовалась для реализации когерентного контроля в статье [2]. Квантовая интерференция различных каналов процесса наблюдалась при возбуждении атомов криптона и ксенона из основного состояния в возбужденное состояние ($5p[5/2]_2$ — в случае криптона и $4f[3/2]_2$ — в случае ксенона) за счет поглощения излучения на основной частоте и его третьей гармоники. Вероятность возбуждения регистрировалась по сигналу фототока, вызванного однофотонной ионизацией возбужденного состояния атома излучением на основной частоте. Фазовая зависимость процесса возникала в результате квантовой интерференции двух каналов возбуждения:

- 1) четырехфотонного поглощения на основной частоте;
- 2) поглощения одного фотона на основной частоте и одного фотона на частоте третьей гармоники.

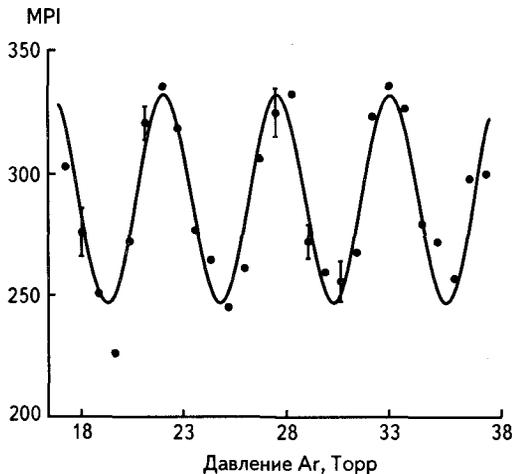


Рис. 10.4. Фазовая модуляция сигнала фототока (когерентный фазовый контроль), зарегистрированная в эксперименте Эллиота с сотрудниками [1]

В этом случае, благодаря высокой нелинейности процесса удалось получить большее значение коэффициента модуляции, чем в работе Эллиота с сотрудниками (рис. 10.4).

Ранее рассматривалось бихроматическое возбуждение атомов в дискретном спектре. Представляет интерес исследовать особенности когерентного контроля при переходе атомного электрона из связанного в автоионизационное состояние. (Автоионизационным называется состояние, которое ионизируется без внешнего воздействия в результате внутренних взаимодействий в системе.) Такой эксперимент был поставлен в работе [3]. Наблюдался фазовый контроль возбуждения атома кальция в автоионизационное состояние $4p7s[1/2]_1^0$ за счет интерференции двух каналов: трехфотонного поглощения на основной частоте и однофотонного поглощения на частоте третьей гармоники (схема контроля «3 + 1», изображенная на рис. 10.5).

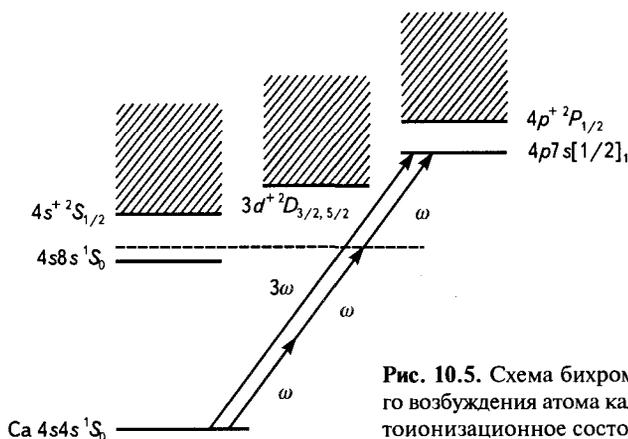


Рис. 10.5. Схема бихроматического возбуждения атома кальция в автоионизационное состояние

В качестве накачки использовалось излучение перестраиваемого лазера на красителе с длиной волны 435 нм, длительностью импульса 10 нс, энергией в импульсе 5 мДж и шириной спектра $0,1\text{ см}^{-1}$. Достигнутая глубина фазовой модуляции составляла примерно 43 %. Авторы статьи [3] отмечали, что данная работа является первым шагом на пути к достижению управления спектральной формой автоионизационного резонанса с помощью вариации бихроматической фазы. Другой важный вывод их эксперимента состоит в демонстрации возможности фазового контроля без фокусировки лазерного излучения, что важно с точки зрения приложений, например, для когерентного контроля фотохимических реакций.

Фазовый контроль может наблюдаться при бихроматическом возбуждении внешнего или внутреннего фотоэффекта в твердом теле. Внешний фотоэффект представляет собой испускание электронов поверхностью твердого тела под действием электромагнитного излучения. Внутренний фотоэффект возникает в результате фотоиндуцированных переходов носителей электрического тока в объеме твердых тел. Эти переходы могут быть межзонными, внутризонными, примесь-зонными, а также происходить между квантово-размерными уровнями энергии в наноструктурированных средах.

Хорошо известно, что в случае центрально-симметричного образца в отсутствие внешнего поля невозможно монохроматическое возбуждение стационарного электрического тока, т. е. отсутствует объемный фотогальванический эффект. В то же время при возбуждении носителей заряда в центрально-симметричном твердом теле под действием бихроматического поля вида (10.14) возможен так называемый когерентный фотогальванический эффект без приложения внешнего напряжения. Первая экспериментальная работа по внутреннему фотоэффекту при бихроматическом возбуждении [4] была посвящена фазовому контролю тока в слоистой полупроводниковой структуре AlGaAs/GaAs. Стандартный фотоприемник на основе данной структуры имеет в инфракрасном диапазоне значительную величину диэлектрической восприимчивости второго порядка $\chi^{(2)}$, ответственной за двухфотонное поглощение. Поэтому возможна квантовая интерференция амплитуд одно- и двухфотонного поглощения при возбуждении переходов между энергетическими подзонами квантовых ям в образце AlGaAs/GaAs. Данное обстоятельство было использовано в работе [4] для реализации фазового контроля фототока.

Квантовая яма представляет собой одномерную потенциальную яму, размер которой порядка длины волны де-Бройля $\lambda^{(DB)}$ захваченной ямой частицы. В случае электрона с энергией E , пользуясь определением длины волны де-Бройля $\lambda^{(DB)} = h/p$, нетрудно получить оценку:

$$\lambda^{(DB)} \propto 2\pi a_B \sqrt{\frac{13,6 [\text{эВ}]}{|E|}},$$

где $a_B \cong 0,53 \text{ \AA}$ — радиус Бора. Если $|E| \approx 0,1 \text{ эВ}$, то $\lambda^{(DB)} \approx 40 \text{ \AA}$, таким образом размер потенциальной ямы лежит в нанометровом диапазоне длин. Если ширина ямы удовлетворяет указанному требованию, то будет иметь место квантование поперечного движения носителей заряда, которое используется в различного рода оптоэлектронных устройствах.

Наноструктуры типа квантовых ям могут быть сформированы в виде тонкого слоя полупроводника с узкой запрещенной зоной E_g , окруженного полупроводником с большей шириной запрещенной зоны, с помощью *молекулярно-лучевой эпитаксии*. В рассматриваемом случае в роли узкозонного полупроводника выступает GaAs ($E_g = 1,5 \text{ эВ}$), а в роли широкозонного — соединение $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в котором доля x атомов галлия заменена атомами алюминия. Ширина запрещенной зоны этого соединения колеблется (в зависимости от величины x) в пределах $1,5 \text{ эВ} < E_g < 2,2 \text{ эВ}$. В эксперименте [4] использовались квантовые ямы с шириной $5,5 \text{ нм}$ и параметром $x = 0,26$. Уровни энергии и волновые функции электрона в квантовой яме данного типа показаны на рис. 10.6.

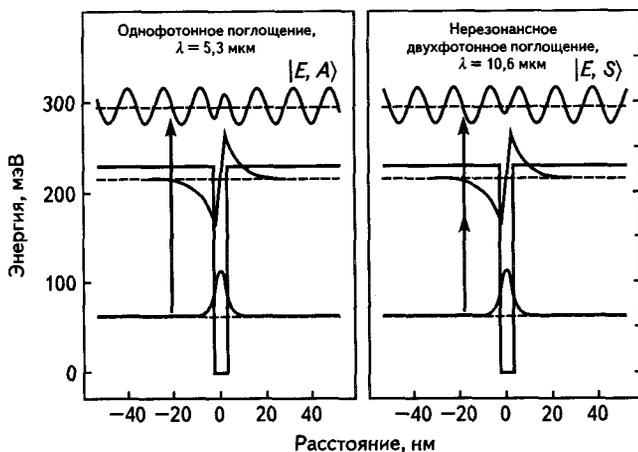


Рис. 10.6. Два канала возбуждения внутреннего фотоэффекта на квантовых ямах в полупроводниковой структуре AlGaAs/GaAs

Фототок в эксперименте возникал в результате возбуждения электронов из основного (связанного) состояния квантовой ямы

в состояние, соответствующее инфинитному движению, под действием бихроматического излучения на длинах волн $\lambda_1 = 10,6$ мкм и $\lambda_2 = 5,3$ мкм (см. рис. 10.6). Таким образом, имелось два канала процесса: однофотонное поглощение на длине волны 5,3 мкм и двухфотонное поглощение на длине волны 10,6 мкм. Фазовый контроль фототока возникал как следствие квантовой интерференции этих каналов. В представленном на рис. 10.6 случае в отличие от возбуждения в дискретном спектре амплитуды обоих каналов отличны от нуля, поскольку верхний энергетический уровень, принадлежащий непрерывному спектру, вырожден по четности. Однофотонное возбуждение происходит в нечетное конечное состояние (A), а двухфотонное возбуждение — в четное состояние (S) той же энергии.

Излучение на основной частоте генерировалось одномодовым CO_2 лазером с длительностью импульсов 100 нс при частоте повторения 2 Гц. Удвоение частоты происходило в кристалле AgGaSe_2 с эффективностью порядка $2 \cdot 10^{-4}$. Величины одно- и двухфотонного поглощения выравнивались с помощью набора фильтров с целью получения максимальной эффективности фазового контроля. Измерение фототока в периодической структуре, состоящей из 25 квантовых ям $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,74}\text{Al}_{0,26}\text{As}$ с толщиной 55 Å и расстоянием между соседними ямами 325 Å, проводилось при температуре $T = 82$ °К. Величина и направление регистрируемого фототока изменялись в интервале 10 мкА за счет вариации относительной фазы $\varphi_{\text{bh}} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$. Вариация бихроматической фазы осуществлялась с помощью поворота пластинки из NaCl, через которую пропускалось бихроматическое излучение. Подчеркнем, что фототок в данном эксперименте возникал без приложения внешнего напряжения к слоистой структуре $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$. Таким образом, в работе [4] была экспериментально продемонстрирована возможность когерентного контроля фотопроцессов в полупроводниковых наноструктурах с помощью бихроматического излучения кратных частот.

Помимо вышеизложенных имеется значительное количество экспериментальных работ по когерентному фазовому контролю фотоионизации атомов и молекул, фотодиссоциации молекул, внешнему фотоэффекту, возбуждению спинового тока в твердых телах под действием бихроматического излучения с кратными частотами (см. обзор [5]).

10.4. БИХРОМАТИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ АТОМОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В данном разделе анализируется новый тип фазового контроля возбуждения атомов в дискретном спектре под действием бихроматического поля, состоящего из излучения на основной частоте и его второй гармоники. Для преодоления обсуждавшегося выше запрета по четности возбуждаемый атом подвергается дополнительному воздействию постоянного электрического поля. Тогда оказывается возможным не только реализовать фазовый контроль бихроматическим полем заданного типа, но и получить дополнительный параметр контроля — напряженность постоянного поля, что может оказаться интересным для практического использования.

Рассмотрим когерентный фазовый контроль возбуждения валентного электрона щелочного атома в дискретном спектре на переходе между состояниями с равными нулю орбитальными моментами. В этом случае вычисление вероятности процесса наиболее просто, а соответствующие лазерные частоты лежат в видимом и ближнем ультрафиолетовом диапазоне.

Итак, пусть на атом щелочного металла воздействует бихроматическое поле, представляющее собой когерентную суперпозицию излучения на основной частоте и его второй гармоники с контролируемой разностью фаз (в формуле (10.14) нужно положить $n = 2$). Предполагаем также, что атом помещен в постоянное и однородное электрическое поле с напряженностью F_0 . Вычислим вероятность бихроматического возбуждения атома из начального состояния $|n_i s\rangle$ в конечное состояние $|n_f s\rangle$. Рассмотрение проводим в предположении справедливости теории возмущений. В отсутствие электрического поля однофотонное поглощение на частоте второй гармоники запрещено правилами отбора. Воздействие электрического поля возмущает начальные и конечные состояния атома, примешивая к ним состояния с противоположной четностью. В результате матричный элемент оператора дипольного момента, определяющий однофотонное поглощение, равен:

$$\begin{aligned} \langle n_f s | \mathbf{d} | n_i s \rangle = & \\ = F_{0k} \sum_j & \left\{ \frac{\langle n_f s | d_k | j p \rangle \langle j p | \mathbf{d} | n_i s \rangle}{E_j - E_{n_f s}} + \frac{\langle n_f s | \mathbf{d} | j p \rangle \langle j p | d_k | n_i s \rangle}{E_j - E_{n_i s}} \right\}. \end{aligned} \quad (10.34)$$

Здесь по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование. При записи правой части (10.34) учтено, что правила отбора разрешают переходы из начального и конечного s -состояний в промежуточные p -состояния ($l_j = 1$). Амплитуда поглощения одного фотона второй гармоники на переходе $|n_i s\rangle \rightarrow |n_f s\rangle$ с учетом возмущения атома постоянным электрическим полем представится в виде:

$$A_{fi}^{(1\text{abs})} = -\langle n_f s | \mathbf{d} | n_i s \rangle \frac{\tilde{E}_{02}}{\hbar} = \frac{1}{2\hbar} F_{0k} E_{02l} \exp(-i\varphi_{02}) \times \sum_j \left\{ \frac{\langle n_f s | d_k | jp \rangle \langle jp | d_l | n_i s \rangle}{E_j - E_{n_f s}} + \frac{\langle n_f s | d_l | jp \rangle \langle jp | d_k | n_i s \rangle}{E_j - E_{n_i s}} \right\}. \quad (10.35)$$

При записи формулы (10.35) учтено, что поглощение индуцируется положительно-частотной составляющей напряженности электрического поля второй гармоники, комплексная амплитуда которой равна:

$$\tilde{E}_{02} = \frac{E_{02}}{2} \exp(-i\varphi_{02}).$$

Сумма по промежуточным состояниям в правой части равенства (10.35) может быть выражена через тензор рассеяния электромагнитного поля с возбуждением атома из начального состояния $|n_i s\rangle$ в конечное состояние $|n_f s\rangle$:

$$c_{fi}^{lk}(\omega', \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_j \left\{ \frac{d_{jf}^l d_{ji}^k}{\omega_{ji} - \omega - i0} + \frac{d_{jf}^k d_{ji}^l}{\omega_{ji} + \omega' - i0} \right\}. \quad (10.36)$$

В результате для амплитуды однофотонного поглощения излучения на частоте второй гармоники получаем следующее выражение:

$$A_{fi}^{(1\text{abs})} = \frac{1}{2\hbar} (F_0 E_{02}) \exp(-i\varphi_{02}) c_{fi}(0, 2\omega). \quad (10.37)$$

При выводе (10.37) было учтено, что для переходов между атомными состояниями с нулевым моментом тензор рассеяния превращается в скаляр:

$$c_{fi}^{lk} = c_{fi} \delta^{lk}.$$

Выражение для амплитуды двухфотонного поглощения излучения на основной частоте может быть получено стандартным образом, как это описано в разд. 6.5:

$$A_{fi}^{(2\text{abs})} = \frac{1}{8\hbar} E_{01}^2 \exp(-2i\varphi_{01}) c_{fi}(-\omega, \omega). \quad (10.38)$$

При записи (10.38) сумма по промежуточным состояниям в формуле (6.40) была выражена через скалярную часть тензора рассеяния, так же как при переходе от выражения (10.35) к формуле (10.37).

Полная вероятность возбуждения атома в единицу времени пропорциональна квадрату модуля суммы амплитуд (10.37) и (10.38). Соответствующее выражение дается равенством:

$$w_{fi}^{(\text{tot})}(\varphi) = \frac{\pi^3}{\hbar^2 c^2} G_{fi}(\omega) I_1^2 \left| c_{fi}(-\omega, \omega) + 4 \cos(\alpha) r_{01} \sqrt{\eta} \exp(-i\Delta\varphi_{\text{bh}}) c_{fi}(0, 2\omega) \right|^2, \quad (10.39)$$

где $r_{01} = F_0/F_{01}$ — отношение напряженности постоянного электрического поля и электрического поля в излучении на основной частоте; I_1 — интенсивность излучения на основной частоте,

$$I_1 = \frac{cE_{01}^2}{8\pi};$$

$\eta = I_2/I_1$ — отношение интенсивностей монохроматических компонент поля (10.14); $G_{fi}(\omega)$ — функция формы линии перехода $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$; α — угол между векторами F_0 и E_{02} ; $\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$ — контролируемый сдвиг фаз между монохроматическими компонентами излучения (10.14) («бихроматическая фаза»). Первое слагаемое под знаком модуля в (10.39) отвечает двухфотонному поглощению на основной частоте, второе слагаемое — однофотонному поглощению на частоте второй гармоники. Подчеркнем, что второе слагаемое в отсутствие постоянного поля равняется нулю для переходов между s -состояниями атома. Преобразуем правую часть равенства (10.39) к виду (10.17):

$$w_{fi}^{(\text{tot})}(\Delta\varphi_{\text{bh}}) = w_{fi}^{(\Sigma)} \left\{ 1 + \frac{k(\eta, r_{01})}{2} \cos(\Delta\varphi_{\text{bh}}) \right\}, \quad (10.40)$$

где $w_{fi}^{(\Sigma)}$ — вероятность возбуждения атома без учета интерференционного члена. Величина $k(\eta, r_{01})$ представляет собой коэффициент

фазовой модуляции, определенный в (10.19). Для него с помощью формулы (10.40) находим следующее выражение:

$$k(\eta, r_{01}) = \frac{16 \cos(\alpha) r_{01} \sqrt{\eta} c_{fi}(-\omega, \omega) c_{fi}(0, 2\omega)}{c_{fi}^2(-\omega, \omega) + 16 \cos^2(\alpha) r_{01}^2 \eta c_{fi}^2(0, 2\omega)}. \quad (10.41)$$

Оптимальные значения величин $r_{01} = F_0/F_{01}$ и $\eta = I_2/I_1$ получают-ся из условия максимальной фазовой модуляции процесса ($k = 2$), что приводит к соотношению:

$$\left(|\cos(\alpha)| \sqrt{\eta} r_{01} \right)_{\text{opt}} = \left| \frac{c_{fi}(-\omega, \omega)}{4c_{fi}(0, 2\omega)} \right|, \quad (10.42)$$

где частота ω удовлетворяет закону сохранения энергии

$$\hbar\omega_{fi} = 2\hbar\omega. \quad (10.43)$$

Отметим, что коэффициент фазовой модуляции (10.41) и оптимальное условие (10.42) не зависят явно от интенсивности излучения I_1 , а определяются отношением интенсивностей $\eta = I_2/I_1$.

Используем полученные формулы для анализа возможности фазового контроля фотовозбуждения в бихроматическом лазерном поле (10.14). В качестве примера рассмотрим переход атома натрия из основного в первое возбужденное состояние с нулевым моментом: $3s \rightarrow 4s$. В этом случае двухфотонное поглощение излучения на основной частоте разрешено дипольными правилами отбора. Запрет по четности на однофотонное поглощение излучения второй гармоники снимается наложением постоянного электрического поля. Резонансная длина волны на частоте основного излучения, для которой выполняется закон сохранения энергии (10.43), равна: $\lambda_1 = 777$ нм.

Согласно (10.40) в зависимости от величины бихроматической фазы $\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$ межканальная интерференция при фотовозбуждении может быть как конструктивной, так и деструктивной. На рис. 10.7 показана полная вероятность возбуждения $4s$ -состояния в атоме натрия под действием бихроматического поля вида (10.14) ($n = 2$) в зависимости от величины напряженности постоянного электрического поля для различных значений бихроматической фазы. Сплошная кривая соответствует значению $\Delta\varphi_{\text{bh}} = \pi$, когда межканальная интерференция носит деструктивный характер: амплитуды двухфотонного и однофотонного процесса вычитаются. В слу-

чае $\Delta\varphi_{bh} = 2\pi$ (штриховая кривая) интерференция конструктивна: амплитуды каналов складываются. Наконец, если $\Delta\varphi_{bh} = \pi/2$ интерференционное слагаемое отсутствует.

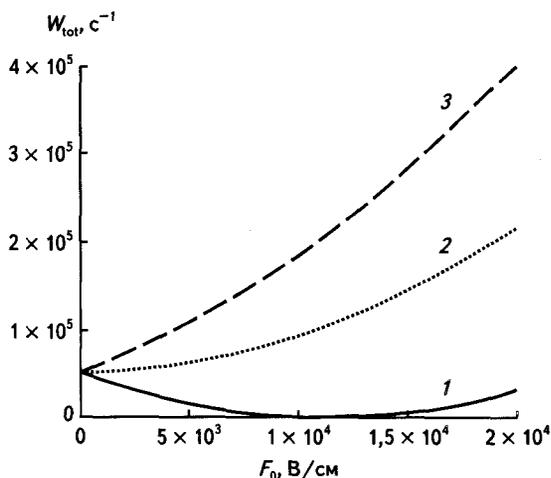


Рис. 10.7. Полная вероятность в единицу времени возбуждения перехода $3s-4s$ в атоме натрия под действием бихроматического излучения (10.14) ($n = 2$) в зависимости от напряженности *постоянного* электрического поля для различных значений бихроматической фазы $\Delta\varphi_{bh} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$:
 1 — $\Delta\varphi_{bh} = \pi$; 2 — $\Delta\varphi_{bh} = 2\pi$; 3 — $\Delta\varphi_{bh} = \pi/2$; $I_1 = 10^4$ Вт/см²; $\eta = 100$; $\alpha = 0$

Из рис. 10.7 следует, что в случае деструктивной интерференции ($\Delta\varphi_{bh} = \pi$) существует такое значение напряженности постоянного электрического поля, при котором полная вероятность возбуждения резонансного перехода в единицу времени обращается в нуль. Иными словами, можно подобрать бихроматическую фазу таким образом, что электронный переход в атоме просветляется для бихроматического излучения (10.14) за счет вариации напряженности постоянного электрического поля. Если же величина бихроматической фазы не равняется строго π (или кратному по модулю 2π), а лежит в интервале $\pi/2 < \Delta\varphi_{bh} < 3\pi/2$, где косинус отрицателен, то точного зануления вероятности возбуждения не происходит. Вместо этого на кривой $w_{fi}^{(tot)}(F_0)$ возникает минимум тем более глубокий, чем ближе величина $\Delta\varphi_{bh}$ к π .

Для наблюдения фазового контроля возбуждения атома в дискретном спектре под действием бихроматического поля может быть использована фотолюминесценция, возникающая в результате излучательных переходов из возбужденного состояния атома на нижележащие уровни энергии. Например, в рассмотренном случае после бихроматического возбуждения $4s$ -состояния в атоме натрия возникнет люминесценция в результате излучательных переходов $4s \rightarrow 3p$ и $3p \rightarrow 3s$. Интенсивность этой люминесценции пропорциональна населенности уровня $4s$ и поэтому может служить мерой вероятности бихроматического возбуждения (10.40).

Вышеизложенная ситуация отвечает возбуждению атомного состояния, *невырожденного по четности*. Как известно, в атоме водорода энергетические уровни имеют такое вырождение. Поэтому его возбуждение бихроматическим излучением с отношением частот $1:2$ [$n = 2$ в формуле (10.14)] в присутствии электрического поля будет иметь свои специфические черты. Итак, рассмотрим бихроматическое возбуждение перехода $1s \rightarrow 2p$ в атоме водорода в случае, когда электрическое поле достаточно сильно, так что можно пренебречь тонким расщеплением энергетических уровней. (Тонкое расщепление отвечает спин-орбитальному взаимодействию, когда уровни с одинаковыми орбитальными и спиновыми числами, но с разными полными моментами обладают различной энергией.) Можно показать, что это соответствует выполнению неравенства: $F_0 \gg 10^3$ В/см, где F_0 — напряженность постоянного поля. Тогда второй энергетический уровень атома водорода расщепится на три подуровня: два невырожденных уровня со смещенными значениями энергии $|\pm\rangle$ и один несмещенный, дважды вырожденный уровень, который не играет роли в нашем рассмотрении, поскольку соответствует состояниям с одинаковой четностью. Волновые функции смещенных уровней энергии равны:

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{2s} \pm \psi_{2p0} \}, \quad (10.44)$$

где ψ_{2s} и ψ_{2p0} — невозмущенные волновые функции атома водорода, причем магнитное квантовое число у волновой функции $2p$ -состояния равно нулю: $m = 0$. Как видно из формулы (10.44), в рассматриваемом случае волновые функции смещенных шарковских компонент являются суперпозицией невозмущенных волновых функций *различной четности*. В результате оказываются отличными от нуля



матричные элементы одно- и двухфотонного возбуждения атома водорода из основного состояния на эти подуровни. Так, однофотонное поглощение определяется вкладом $2p$ -состояния в волновые функции (10.44), а двухфотонное поглощение — вкладом $2s$ -состояния. Специфика рассматриваемой ситуации состоит в том, что коэффициенты разложения волновых функций (10.44) по невозмущенным функциям не зависят от напряженности постоянного электрического поля в отличие от случая щелочных атомов.

Частоты переходов из основного состояния атома водорода на смещенные подуровни (10.44) равны:

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \pm 3F_0, \quad (10.45)$$

где $\omega_0 = 3/8$ ат. ед. — невозмущенная частота перехода $n = 1 \rightarrow n = 2$ (здесь n — главное квантовое число) в атоме водорода без учета тонкого расщепления. Равенство (10.45) представляет собой линейный эффект Штарка.

При выполнении закона сохранения энергии $2\omega = \omega_+$ или $2\omega = \omega_-$ бихроматическое излучение (10.14) ($n = 2$) возбуждает смещенные подуровни (10.44) по двум каналам: в результате однофотонного поглощения второй гармоники и в результате двухфотонного поглощения на основной частоте. Вероятность в единицу времени этого процесса, вычисленная в рамках применимости теории возмущений, равна:

$$w_{\pm}^{(\text{tot})} = 2\pi G_{\pm}(\omega) \left| \mp \frac{z_{2p1s} \cos \alpha}{2\sqrt{2}} E_{02} e^{-i\varphi_{02}} + \frac{c_{2s1s}}{8\sqrt{2}} E_{01}^2 e^{-2i\varphi_{01}} \right|^2, \quad (10.46)$$

где z_{2p1s} ат. ед. — матричный элемент электрического дипольного момента для перехода $1s \rightarrow 2p$ в невозмущенном атоме водорода; α — угол между вектором напряженности постоянного электрического поля и вектором напряженности электрического поля второй гармоники; $c_{2s1s} \equiv c_{2s1s}(-\omega, \omega)$ — скалярная часть тензора рассеяния электромагнитного излучения с возбуждением атома из $1s$ в $2s$ состоянии; $G_{\pm}(\omega)$ — функции формы линии смещенных штарковских компонент (10.44). Выражение (10.46) можно представить в виде (10.40) как функцию бихроматической фазы $\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_{02} - 2\varphi_{01}$:

$$w_{\pm}^{(\text{tot})} = w_{\pm}^{(\Sigma)} \left\{ 1 \pm \frac{k(I_1, \eta, \alpha)}{2} \cos(\Delta\varphi_{\text{bh}}) \right\} \quad (10.47)$$

через коэффициент фазовой модуляции, который в данном случае равен:

$$k(I_1, \eta, \alpha) = \frac{4 \cos \alpha z_{2p1s} |c_{2s1s}| \sqrt{2\pi\eta c I_1}}{2\eta c \cos^2 \alpha z_{2p1s}^2 + \pi I_1 c_{2s1s}^2}. \quad (10.48)$$

Здесь $\eta = I_2/I_1$ — отношение интенсивностей монохроматических компонент; c — скорость света.

В отличие от бихроматического возбуждения щелочных атомов (10.41) коэффициент фазовой модуляции (10.48) не зависит от напряженности постоянного электрического поля F_0 , которая определяет резонансные частоты (10.45). В то же время он явно содержит интенсивность излучения на основной частоте I_1 наряду с параметром $\eta = I_2/I_1$. Коэффициент фазовой модуляции (10.48) не зависит от того, в какую из смещенных штарковских компонент возбуждается атом. В то же время, как это видно из равенства (10.47), фазовые зависимости вероятностей возбуждения подуровней $|\pm\rangle$ сдвинуты друг по отношению к другу на 180° . Так, например, если

$$w_-^{(\text{tot})}(\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_0) = 0$$

(переход $|1s\rangle \rightarrow |-\rangle$ «просветлен»), то вероятность

$$w_+^{(\text{tot})}(\Delta\varphi_{\text{bh}} = \varphi_0) = 0$$

как функция бихроматической фазы достигает своего максимума.

Равенство (10.48) удобно представить в форме:

$$k(I_1) = \frac{4\sqrt{I_1/I_1^{(\text{opt})}}}{1 + I_1/I_1^{(\text{opt})}}, \quad (10.49)$$

где $I_1^{(\text{opt})}$ — оптимальное значение интенсивности излучения на основной частоте, при котором фазовая модуляция вероятности возбуждения (10.47) максимальна,

$$I_1^{(\text{opt})} = \frac{c}{2\pi} \left(\frac{2z_{2p1s} \cos \alpha}{c_{2s1s}} \right)^2 \eta. \quad (10.50)$$

Напомним, что зависимость $I_1^{(\text{opt})}(\eta, \alpha)$ определяется равенством $k(I_1, \eta, \alpha) = 2$. Формулы (10.49), (10.50) дают наглядное представление об эффективности фазового контроля в широком диапазоне изменений интенсивностей монохроматических компонент и угла α .

Экспериментальное наблюдение фазового контроля в рассмотренном случае может быть осуществлено с помощью описанного выше люминесцентного метода.

Литература

1. *Ce Chen, Yi-Yian Yin, and Elliot D.S.* Interference between optical transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 1990. V. 64, pp. 507—509.
2. *Karapanagioti N.E., Xenakis D., Charalambidis D., Fotakis C.* Coherent control in four-photon excitation schemes. *J. Phys. B*, 1996, V. 29, pp. 3599—3609.
3. *Xenakis D., Karapanagioti N.E., Faucher O., Hertz E., Charalambidis D.* Observation of field phase dependent autoionization. *J. Phys. B*, 1999. V. 32, pp.341—348.
4. *Dupont E., Corkum P.B., Liu H.C. et al.* Phase-controlled currents in semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 1995. V. 74, pp. 3596—3599.
5. *Астапенко В.А.* Когерентный фазовый контроль возбуждения атомов бихроматическим лазерным излучением в присутствии электрического поля. *Квантовая электроника*. 2005. Т. 356 № 6, с. 541—546.

11.1. ДВА КАНАЛА ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АТОМЕ

Излучение фотона при рассеянии заряженной частицы на атоме (ионе, молекуле, кластере и т. д.) называется *тормозным излучением*. Начальное и конечное состояния излучающей частицы в этом процессе принадлежат непрерывному спектру, а энергия излучения черпается из ее кинетической энергии. Рассмотрим сначала наиболее простой случай, когда нерелятивистский электрон рассеивается на «голом» ядре (т. е. ядре без связанных электронов) с зарядовым числом Z . Используем классическое выражение для мощности дипольного излучения Q через ускорение рассеивающегося электрона w (ускорением ядра можно пренебречь из-за его большой массы):

$$Q(t) = \frac{2e^2}{3c^3} w^2(t). \quad (11.1)$$

Полная энергия тормозного излучения за все время столкновения равна:

$$E = \frac{4e^2}{3c^3} \int_0^\infty |w(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (11.2)$$

При выводе (11.2) было использовано соотношение:

$$\int_{-\infty}^\infty f^2(t) dt = 2 \int_0^\infty |f(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (11.3)$$

где $f(t)$ — действительная функция времени; $f(\omega)$ — ее Фурье-компонента. Чтобы вычислить компоненту Фурье-ускорения

$w(\omega)$, нужно конкретизировать характер движения частицы. Хорошо известно, что в случае поля центральных сил сохраняется момент количества электрона $M = mv\rho$, где v — скорость электрона (на бесконечном удалении от ядра); ρ — прицельный параметр (рис. 11.1).

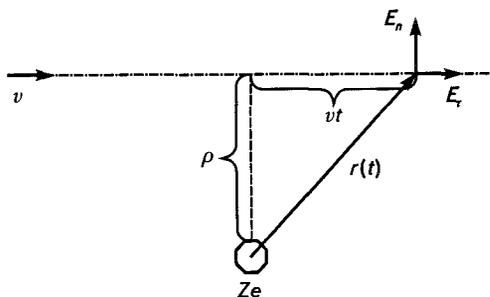


Рис. 11.1. Схема рассеяния электрона на ядре в приближении прямопролетных траекторий (ρ — прицельный параметр)

Таким образом, движение частицы в потенциале $U(r = |\mathbf{r}|)$ характеризуется двумя величинами: начальной скоростью и прицельным параметром, так что компонента Фурье ускорения зависит также от ρ : $w(\omega) \rightarrow w_\rho(\omega)$. Для последней величины имеем:

$$w_\rho(\omega) = \frac{e}{m} E(\omega, \rho), \quad (11.4)$$

где $E(\omega, \rho)$ — компонента Фурье напряженности электрического поля ядра, действующего на рассеивающийся электрон с заданным прицельным параметром. Вычислим $E(\omega, \rho)$ в приближении прямопролетных траекторий движения электрона. Данное приближение справедливо для «далеких» столкновений, когда $\rho > a_c$ ($a_c = Ze^2/mv^2$ — кулоновская длина). Отметим, что данный подход использовал Э. Ферми при расчете возбуждения атомов заряженными частицами. Используя простейшие электродинамические формулы, находим для компоненты Фурье напряженности электрического поля ядра:

$$E(\omega, \rho) = \frac{2Ze}{\rho v} \left\{ F\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_n - iF'\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_\tau \right\}, \quad (11.5)$$

где e_n, e_τ — нормальный и тангенциальный (по отношению к вектору скорости v) единичные векторы (см. рис. 11.1);

$$F(\zeta) = \int_0^\infty \frac{\cos(\zeta x)}{(1+x^2)^{3/2}} dx, \quad (11.6)$$

штрих обозначает дифференцирование по аргументу.

Из формулы (11.2) с учетом (11.4) вытекает следующее выражение для дифференциальной по частоте фотона энергии тормозного излучения:

$$\frac{dE_\rho}{d\omega} = \frac{2e^4}{3\pi m^2 c^3} |E(\omega, \rho)|^2. \quad (11.7)$$

Вероятность тормозного излучения при рассеянии электрона с заданным прицельным параметром и частотой связана с энергией (11.7) соотношением:

$$\frac{dW_\rho}{d\omega} = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{dE_\rho}{d\omega}, \quad (11.8)$$

а дифференциальное (по частоте) сечение процесса равно:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 2\pi \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{dW_\rho}{d\omega} \rho d\rho, \quad (11.9)$$

где ρ_{\min}, ρ_{\max} — минимальный и максимальный прицельные параметры. Собирая формулы (11.7)—(11.9), получаем

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{4e^4}{3m^2 c^3 \hbar\omega} \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} |E(\omega, \rho)|^2 \rho d\rho. \quad (11.10)$$

Отсюда в приближении прямопролетных траекторий имеем для спектрального сечения тормозного излучения электрона на «голом» ядре:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16Z^2 e^6}{3m^2 v^2 c^3 \hbar\omega} \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{d\rho}{\rho} \left\{ F^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) + F'^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \right\}, \quad (11.11)$$

где функция $F(\zeta)$ дается формулой (11.6).

Классического рассмотрения оказывается недостаточно, чтобы определить пределы интегрирования в (11.11) по прицельному параметру. Для этого необходимо привлечь квантовые соображения. Так, минимальная величина ρ_{\min} определяется длиной волны де-Бройля рассеивающегося электрона:

$$\rho_{\min} \approx \lambda_{\text{ДВ}} = \frac{\hbar}{mv}. \quad (11.12)$$

Соотношение (11.12) отражает тот факт, что местоположение квантовой частицы не может быть определено точнее, чем пространственная «размытость» ее волновой функции, которая характеризуется длиной волны де Бройля. Для определения максимального прицельного параметра ρ_{\max} нужно воспользоваться законом сохранения энергии в тормозном излучении и связью изменения импульса налетающего электрона с величиной ρ : $\Delta p \approx \hbar/\rho$, тогда можно получить:

$$\rho_{\max} \approx \frac{v}{\omega}. \quad (11.13)$$

При выводе (11.13) использовался закон сохранения энергии в форме $\hbar\omega = v\Delta p$, справедливой для малых изменений импульса электрона $|\Delta p| = p$, что отвечает приближению прямопролетных траекторий. Данное приближение, реализующееся при далеких столкновениях $\rho > a_c$, $a_c = Ze^2/mv$ — кулоновская длина подразумевает слабость взаимодействия налетающей частицы с ядром-мишенью. Естественно, что при слабом взаимодействии будут излучаться в основном низкочастотные фотоны. Можно показать, что соответствующее условие имеет вид: $\omega < \omega_c$, где $\omega_c = v/a_c$ — кулоновская частота. В низкочастотной области аргумент функции $F(\zeta)$ и ее производной $F'(\zeta)$ меньше единицы $\zeta = \omega\rho/v < 1$, так что, как это следует из определения (11.6), можно воспользоваться следующими приближенными равенствами: $F(\zeta) \approx 1$ и $F'(\zeta) \approx 0$. В результате вместо (11.11) имеем:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16Z^2e^6}{3m^2v^2c^3\hbar\omega} \ln\left(\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}\right). \quad (11.14)$$

Полученное выражение легко обобщить на произвольную рассеивающуюся частицу, для которой выполняются используемые приближения. Для этого в формулах (11.1) и (11.4) нужно произвести

замены: $e \rightarrow e_p$, $m \rightarrow m_p$, где e_p , m_p — заряд и масса налетающей частицы (projectile). Тогда с учетом (11.12), (11.13) из (11.14) приходим к окончательному выражению для спектрального тормозного излучения нерелятивистской заряженной частицы на «голом» ядре в низкочастотном приближении ($\hbar\omega \ll m_p v^2/2$):

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16Z^2 e^2 e_p^4}{3m_p^2 v^2 c^3 \hbar\omega} \ln\left(\frac{m_p v^2}{\hbar\omega}\right). \quad (11.15)$$

Из полученного равенства следует, что сечение тормозного излучения *обратно пропорционально квадрату массы налетающей частицы*. Таким образом, при переходе от легких заряженных частиц (электрона, позитрона) к тяжелым (протону, альфа-частице и т. д.) сечение рассматриваемого процесса уменьшается более чем в миллион раз. Этот вывод дал основание к широко известному утверждению о том, что тяжелые заряженные частицы не излучают тормозные фотоны. Как станет ясно из дальнейшего, данное утверждение нуждается в существенной корректировке.

Спектральная интенсивность излучения равна сечению процесса, умноженному на поток налетающих частиц и энергию излучаемого фотона, так что (11.16) дает:

$$\frac{dI}{d\omega} = \frac{16Z^2 e^2 e_p^4}{3m_p^2 v c^3} \ln\left(\frac{m_p v^2}{\hbar\omega}\right). \quad (11.16)$$

Как уже говорилось, формулы (11.15) и (11.16) получены в приближении далеких столкновений, отвечающих излучению низкочастотных фотонов. Вклад в тормозное излучение высокочастотных фотонов $\omega > \omega_c$ дают близкие столкновения $\rho < a_c$, соответствующие сильно искривленным траекториям. Спектральное сечение и интенсивность тормозного излучения электрона в этом случае описываются формулами Крамерса:

$$\frac{d\sigma^{(\text{Kram})}}{d\omega} = \frac{16\pi Z^2 e^6}{3\sqrt{3} m^2 v^2 c^3 \hbar\omega}; \quad (11.17)$$

$$\frac{dI^{(\text{Kram})}}{d\omega} = \frac{16\pi Z^2 e^6}{3\sqrt{3} m^2 v c^3}. \quad (11.18)$$

В правую часть равенства (11.18) не входит постоянная Планка, что говорит о чисто классическом характере данного выражения.

Интересно отметить, что формулы Крамерса описывают не только тормозное излучение, но и фоторекомбинацию, когда конечное состояние излучающего электрона принадлежит дискретному спектру иона, т. е. является связанным. Указанное обстоятельство является следствием того факта, что излучение в высокочастотном пределе $\omega > \omega_C$ «собирается» с участка траектории наибольшего сближения с ядром, так что излучающий электрон «не знает», куда он попадет после излучения фотона.

Выражения (11.15) и (11.16) получены в рамках классического рассмотрения с квантовыми «вставками» (11.12) и (11.13). Ясно, что такой подход не является последовательным, но его важным достоинством является физическая прозрачность и математическая простота. Здесь уместно отметить, что использование квантово-механического формализма в рамках *борновского приближения* приводит к таким же формулам для сечения и интенсивности тормозного излучения низкочастотных фотонов, что и (11.15) и (11.16).

Критерий борновского приближения дается неравенством:

$$\frac{Z|ee_p|}{\hbar v} \ll 1, \quad (11.19)$$

т. е. отвечает достаточно быстрым налетающим частицам. Условие (11.19) позволяет рассчитывать сечение рассеяния по теории возмущений, причем отношение $Z|ee_p|/\hbar v$ служит малым параметром теории. Возможность классического рассмотрения дается неравенством, обратным к (11.19), так что вышесотмеченное совпадение результатов является в известной мере случайным фактом, таким как, например, совпадение классического и квантового результата для резерфордского сечения рассеяния электрона на ядре.

При переходе к тормозному излучению на атоме нужно учесть экранирующее влияние связанных электронов, что приводит к замене

$$\rho_{\max} \rightarrow \min\left(\frac{v}{\omega}, r_a\right) \quad (11.20)$$

(r_a — атомный радиус) в выражениях для сечения и интенсивности процесса. Действительно, для прицельных параметров $\rho > r_a$ поле атома равно нулю, так что ускорение налетающей частицы отсут-

ствует, а с ним согласно (11.1) отсутствует и тормозное излучение. Ясно, что экранировка существенна для достаточно низких частот $\omega < v/r_a$, в противном случае налетающая частица должна пролететь достаточно близко к ядру, чтобы излучить фотон заданной частоты.

В случае тормозного излучения на многоэлектронных атомах, когда «работает» модель Томаса—Ферми, в качестве атомного радиуса можно использовать радиус Томаса—Ферми:

$$r_a \approx r_{TF} = \frac{a_B b}{\sqrt[3]{Z}},$$

где $a_B \approx 0,53 \text{ \AA}$ — боровский радиус; Z — зарядовое число атомного ядра; $b \approx 0,8553$ — константа.

Замена (11.20) отвечает *приближению экранировки* в теории тормозного излучения, использовавшемуся Г. Бете и В. Гайтлером при обобщении формул для сечения процесса на атомный случай. Физически приближение экранировки означает замену атомных электронов созданным ими распределением электростатического заряда, экранирующим ядро. Таким образом, связанные электроны исключаются из рассмотрения как динамическая степень свободы, способная возбуждаться в ходе тормозного излучения и рассеивать электромагнитное поле налетающей частицы. На самом деле при излучении жестких фотонов избыток энергии-импульса может передаваться атомным электронам, приводя к их возбуждению и ионизации.

Помимо вышеуказанного реального возбуждения, атомные электроны при столкновении атома с заряженной частицей могут возбуждаться *виртуально*. Виртуальное возбуждение отвечает возникновению в атоме переменного дипольного момента, который в соответствии с основными положениями электродинамики должен излучать электромагнитные волны. Такой процесс называется *поляризационным тормозным излучением*, поскольку связан с динамической поляризуемостью атома, которая определяет излучающий дипольный момент.

Поляризационному тормозному излучению можно дать и другую интерпретацию, как процессу рассеяния собственного поля налетающей частицы (виртуального фотона) в поле излучения (реальный фотон) на атомных электронах. Поляризационное тормозное излучение является дополнительным каналом излучения при рассеянии заряда на мишени, обладающей системой связанных электронов. Обычное тормозное излучение, существующее и на «голом» ядре,

будем называть традиционным или статическим. Последний термин подразумевает, что этот канал является единственным в модели статического распределения электронного заряда связанных электронов.

Выведем формулы для поляризационного тормозного излучения быстрой заряженной частицы на атоме, считая атом точечным диполем с поляризуемостью $\beta(\omega)$. Для описания движения налетающей частицы используем, как и выше, классический подход и приближение прямопролетных траекторий. Снова исходим из формулы для мощности дипольного излучения, но на этот раз запишем ее через дипольный момент излучающей системы:

$$Q(t) = \frac{2}{3c^3} \left| \ddot{\mathbf{d}}(t) \right|^2. \quad (11.21)$$

Здесь две точки обозначают вторую производную по времени. Интегрируя равенство (11.21) по времени и используя формулу (11.3) для квадрата второй производной дипольного момента, приходим к выражению для полной энергии поляризационного тормозного излучения за все время столкновения, отвечающего прицельному параметру ρ :

$$E = \frac{4e^2}{3c^3} \int_0^\infty \omega^4 \left| \beta(\omega) \mathbf{E}^{(\rho)}(\omega, \rho) \right|^2 \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (11.22)$$

где $\mathbf{E}^{(\rho)}(\omega, \rho)$ — компонента Фурье напряженности электрического поля налетающей заряженной частицы в месте расположения атома. При выводе этой формулы было использовано соотношение:

$$\ddot{\mathbf{d}}(\omega) = -\omega^2 \mathbf{d}(\omega),$$

следующее из определения компонент Фурье.

Переходя от полной излученной энергии к спектральному сечению, так как это делалось при выводе формулы (11.10), получаем для поляризационного тормозного излучения (Polarization Bremsstrahlung [1]) следующее выражение:

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{4\omega^3 \left| \beta(\omega) \right|^2}{3c^3 \hbar} \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \left| \mathbf{E}^{(\rho)}(\omega, \rho) \right|^2 \rho d\rho. \quad (11.23)$$

Верхний предел интегрирования в этой формуле, вытекающий из закона сохранения энергии, определяется равенством (11.13), тем

же, что и для статического тормозного излучения. Нижний же предел интегрирования существенно иной. В рассматриваемом приближении точечного диполя он определяется размером атома:

$$\tilde{\rho}_{\min} = r_a. \quad (11.24)$$

Как показывает анализ, рассеяние на малых прицельных параметрах $\rho < r_a$ дает малый вклад в сечение поляризационного тормозного излучения, поскольку тогда теряется когерентность в переизлучении собственного поля налетающей частицы атомными электронами в реальный фотон.

Из рис. 11.1 легко видеть, что компоненту Фурье напряженности электрического поля налетающей частицы в приближении прямополетных траекторий можно вычислить по формуле, аналогичной (11.5), с заменой заряда ядра на заряд налетающей частицы. В результате для напряженности $E^{(p)}(\omega, \rho)$ имеем:

$$E^{(p)}(\omega, \rho) = \frac{2e_p}{\rho v} \left\{ -F\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_n + iF'\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_\tau \right\}, \quad (11.25)$$

где \mathbf{e}_n , \mathbf{e}_τ — нормальный и тангенциальный единичные векторы, функция $F(\zeta)$ дается равенством (11.6). Подставляя (11.25) в (11.23), получаем спектральное сечение поляризационного тормозного излучения в используемом приближении:

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{16e_p^2\omega^3 |\beta(\omega)|^2}{3v^2c^3\hbar} \int_{r_a}^{v/\omega} \frac{d\rho}{\rho} \left\{ F^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) + F'^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \right\} d\rho. \quad (11.26)$$

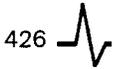
Отсюда для интенсивности находим:

$$\frac{dI^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{16e_p^2\omega^4 |\beta(\omega)|^2}{3vc^3} \int_{r_a}^{v/\omega} \frac{d\rho}{\rho} \left\{ F^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) + F'^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \right\} d\rho. \quad (11.27)$$

Отметим, что формула (11.27) не содержит постоянной Планка, что говорит о ее классическом характере.

В пределе низких частот, когда $F(\zeta) \approx 1$ и $F'(\zeta) \approx 0$, формула (11.26) дает:

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{16e_p^2\omega^3 |\beta(\omega)|^2}{3v^2c^3\hbar} \ln\left(\frac{v}{\omega r_a}\right). \quad (11.28)$$



Данное выражение справедливо для частот $\omega < v/r_a$, в противном случае нужно пользоваться формулой (11.26). Расчет, однако, показывает, что в частотном диапазоне $\omega > v/r_a$ поляризационное тормозное излучение мало.

Сечение (11.28) может быть получено в рамках квантового подхода в случае справедливости борновского приближения (11.19), т. е. для быстрых (но нерелятивистских) налетающих частиц.

Важно подчеркнуть, что сечения поляризационного тормозного излучения (11.26), (11.28) не зависят от массы налетающей частицы в контрасте с сечением статического тормозного излучения (11.16). Таким образом, бытовавшее долгое время в физике утверждение о том, что тяжелые заряженные частицы не излучают тормозные фотоны, не распространяется на поляризационный канал. Данное обстоятельство связано с тем, что сечение статического тормозного излучения пропорционально квадрату ускорения налетающей частицы, в то время как сечение поляризационного канала от этого ускорения не зависит.

Сечение поляризационного тормозного излучения (11.28) можно получить из сечения статического процесса (11.15) с помощью замен

$$m_p \rightarrow m, \quad e_p^4 \rightarrow e^2 e_p^2, \quad \rho_{\min} \rightarrow \tilde{\rho}_{\min},$$

$$Z \rightarrow Z_{\text{pol}}(\omega), \quad (11.29)$$

где $Z_{\text{pol}}(\omega)$ — эффективный поляризационный заряд атома (в единицах заряда электрона e),

$$Z_{\text{pol}}(\omega) = \frac{m\omega^2}{e^2} |\beta(\omega)|^2. \quad (11.30)$$

Поляризационный заряд характеризует способность электронного остова атома к излучению фотона под действием переменного электрического поля. В отличие от обычного заряда поляризационный заряд зависит от частоты излучения. Частотная зависимость поляризационных зарядов атомов серебра и криптона представлена на рис. 11.2.

Из этого рисунка видно, что в высокочастотном диапазоне поляризационный заряд равен числу связанных электронов атома (или зарядовому числу его ядра). Данное обстоятельство вытекает из оп-

ределения (11.30) и формулы для высокочастотной поляризуемости (5.16). В области малых частот $\omega \rightarrow 0$ поляризационный заряд в соответствии с (11.30) убывает квадратично, поскольку тогда поляризуемость атома равна своему статическому значению (5.15), т. е. не зависит от частоты. Наконец в промежуточном спектральном диапазоне поляризационный заряд является немонотонной функцией, которая отражает особенности энергетического спектра атома. Так, например, широкий «провал» на штриховой кривой рис. 11.2 в интервале 1600—1750 эВ отвечает энергии связи $2p$ электронов в атоме криптона. Минимум в области малых частот отвечает виртуальному возбуждению подболочек атома с главным квантовым числом $n = 3$. Таким образом, спектральное сечение поляризационного тормозного излучения отражает динамику атомного остова как функцию частоты.

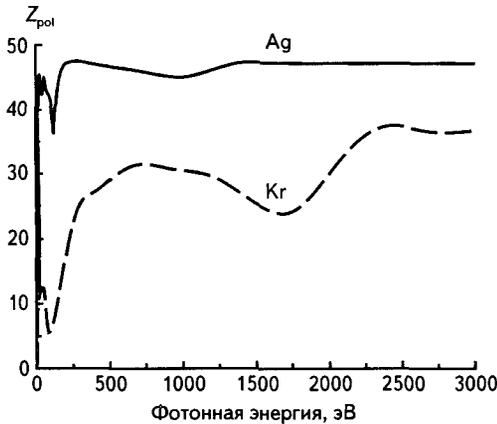


Рис. 11.2. Спектральная зависимость поляризационного заряда атомов серебра и криптона

В высокочастотном пределе, когда $\omega \gg \omega_a$ (ω_a — характерная частота возбуждения атома в дискретном спектре), но по-прежнему

$$\omega < \frac{v}{r_a}; \quad \beta(\omega) \approx -\frac{Ze^2}{m\omega^2} \quad (Z_{\text{pol}}(\omega) = Z)$$

и формула (11.28) дает:

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{16Z^2e^4e_p^2}{3m^2v^2c^3\hbar\omega} \ln\left(\frac{v}{\omega r_a}\right). \quad (11.31)$$

Любопытно отметить, что в случае налетающего электрона (позитрона) полученное выражение лишь логарифмическим множителем отличается от формулы для сечения статического тормозного излучения (11.16).

Рассмотрим теперь резонансный случай, когда частота тормозного излучения близка к одной из собственных частот атома $\omega \approx \omega_0$, и динамическая поляризуемость имеет вид:

$$\beta(\omega \approx \omega_0) \cong \frac{e^2}{m} \frac{f_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\omega\gamma_0}. \quad (11.32)$$

Это выражение для резонансной поляризуемости следует из общей формулы (5.14), если в ней оставить одно резонансное слагаемое, в котором $\omega_{nm} \equiv \omega_0$, $f_{nm} \equiv f_0$ и $\gamma_{nm} \equiv \gamma_0$. Подставляя формулу (11.30) в (11.28), получаем

$$\frac{d\sigma^{\text{res}}}{d\omega} = \frac{4}{3} \frac{e_p^2}{\hbar c} \left(\frac{c}{v}\right)^2 \frac{r_e^2 f_0^2 \omega_0}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma_0^2} \ln\left(\frac{v}{\omega r_a}\right), \quad (11.33)$$

где r_e — классический радиус электрона,

$$r_e = \frac{e^2}{mc^2} \approx 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Из выражения (11.33) видно, что резонансное поляризационное тормозное излучение имеет резкий максимум на частоте $\omega = \omega_0$, если $\gamma_0 \ll \omega_0$. Последнее неравенство выполняется при возбуждении в дискретном спектре электронов внешней оболочки атома, так что для нейтрального атома энергии резонансных фотонов порядка 10 эВ. В случае многозарядных ионов, обладающих системой связанных электронов (электронным остовом), эти энергии могут быть существенно выше и достигать величины порядка нескольких килоэлектронвольт. Тогда, однако, велика также константа затухания перехода, равная коэффициенту Эйнштейна A_{mn} , и поэтому резонанс становится не таким острым. На частотах, соответствующих виртуальному возбуждению внутренних оболочек атомов, резонансная структура в спектральной зависимости динамической поляризуемости $\beta(\omega)$ исчезает. Вместо нее на спектральных кривых возникают «провалы», отвечающие началу фотоионизации атомной подоболочки (см. рис. 11.2).

Таким образом, резонансные эффекты в рассмотренном выше спонтанном поляризационном тормозном излучении существенны только в узком интервале частот вблизи резонанса и слабо выражены в интегральных характеристиках излучения. Ситуация меняется при переходе к *вынужденному* тормозному излучению, которое также называется *вынужденным тормозным эффектом*.

11.2. ВЫНУЖДЕННЫЙ ТОРМОЗНОЙ ЭФФЕКТ

Вынужденный тормозной эффект представляет собой процесс неупругого рассеяния электрона на мишени (атоме, ионе и т. д.) в поле электромагнитного излучения, в результате которого происходит обмен энергией между излучением и электроном. Различают тормозной эффект, когда электрон отдает свою энергию излучению (как в спонтанном тормозном излучении), и *обратный тормозной эффект*, когда электрон в ходе рассеяния поглощает фотон из поля излучения, увеличивая тем самым свою энергию.

Поскольку в вынужденном тормозном эффекте фиксирована поляризация излучения и волновой вектор фотона, то для вывода формулы для сечения этого процесса нужно вместо (11.1) и (11.21) использовать следующее выражение для мощности спонтанного излучения:

$$dQ = \frac{e^2 (\mathbf{e}_k \mathbf{w})^2}{4\pi c^3} d\Omega_k, \quad (11.34)$$

где \mathbf{e}_k — единичный вектор поляризации спонтанного излучения; \mathbf{w} — ускорение рассеивающегося заряда. Если просуммировать правую часть (11.34) по поляризациям и проинтегрировать по телесному углу вылета фотона $d\Omega_k$, то получим формулу (11.1).

Схема вывода сечения обычного (статического) тормозного эффекта в приближении прямопролетных траекторий примерно та же, что использовалась в предыдущем разделе. Разница состоит в необходимости учета квадрата модуля скалярного произведения $|\mathbf{e}_k \mathbf{w}|^2$, который с помощью формул (11.2)—(11.4) преобразуется к виду

$$\left(\frac{e}{m}\right)^2 \left[[\mathbf{e}_k \mathbf{E}_\tau(\omega, \rho)] + [\mathbf{e}_k \mathbf{E}_n(\omega, \rho)] \right]^2,$$

где $E_{\tau, n}$ — тангенциальная и нормальная (по отношению к вектору скорости налетающей частицы) компоненты электрического поля ядра. С учетом выражений для векторов $E_{\tau, n}$, которые следуют из формулы (11.5), имеем:

$$\begin{aligned} |e_k E(\omega, \rho)|^2 &= \frac{4Z^2 e^2}{\rho^2 v^2} \left| \left[e_k, e_n F\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) - ie_\tau F'\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \right] \right|^2 = \\ &= \frac{4Z^2 e^2}{\rho^2 v^2} \left\{ (e_k e_n)^2 F^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) + (e_k e_\tau)^2 F'^2\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (11.35)$$

где $F(\zeta)$ дается формулой (11.6).

В рассматриваемом случае из-за наличия вектора e_k отсутствует аксиальная симметрия задачи, поэтому при интегрировании по прицельному параметру в формуле (11.9) нужно ввести интегрирование квадрата скалярного произведения (11.35) по азимутальному углу φ , который определяет траекторию движения налетающей частицы. Угол φ можно задать как угол между единичным вектором e_n (перпендикулярным направлению движения) и плоскостью, проходящей через вектор скорости v и вектор поляризации излучения e_k (рис. 11.3). Тогда для скалярных произведений, входящих в (11.35), справедливы равенства:

$$(e_k e_n) = \sin \alpha \cos \varphi; \quad (e_k e_\tau) = \cos \alpha, \quad (11.36)$$

где α — угол между вектором скорости рассеивающегося заряда v и вектором поляризации поля излучения e_k .

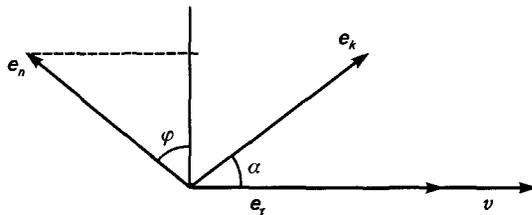


Рис. 11.3. Геометрия вынужденного тормозного эффекта

Чтобы перейти к выражениям для вынужденного тормозного эффекта, в формулах для спонтанного процесса нужно произвести замену:

$$\frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3 c^3} d\omega d\Omega_k \rightarrow \frac{E_0^2}{8\pi}. \quad (11.37)$$

Данная формула отвечает замене пространственной плотности энергии электромагнитного поля вакуума в интервале частот $d\omega$ и углов $d\Omega_k$ с заданной поляризацией e_k на ту же величину, относящуюся к монохроматическому излучению с частотой ω и амплитудой электрического поля $E_0 = e_0 E_0$.

При описании вынужденного процесса нужно заменить вектор поляризации e_k на вектор поляризации внешнего поля e_0 (поскольку в вынужденном излучении характеристики фотона внешнего поля и излучаемого фотона совпадают) и дифференциал сечения $d\sigma$ на полное сечение σ .

Используя соотношения (11.35)–(11.37), получаем из равенства (11.32) после перехода к Фурье-образу ускорения и спектральному сечению [см. (11.2)–(11.4)], а также интегрирования по азимутальному углу φ следующее выражение:

$$\sigma(\omega, v) = \quad (11.38)$$

$$= 2\pi \left(\frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \left[\frac{eE_0}{m\omega^2} \right]^2 \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{d\rho}{\rho} \left\{ F^2 \left(\frac{\omega\rho}{v} \right) \frac{\sin^2 \alpha}{2} + F'^2 \left(\frac{\omega\rho}{v} \right) \cos^2 \alpha \right\},$$

где минимальный прицельный параметр ρ_{\min} определяется формулой (11.12), а максимальный ρ_{\max} дается соотношением (11.20). Величина размерности длины в квадратных скобках (11.38) имеет смысл амплитуды осцилляций электрона в монохроматическом поле заданной частоты и амплитуды.

Таким образом, в рамках классической картины с квантовыми вставками (11.12) и (11.20) мы получили выражение (11.38) для сечения вынужденного тормозного эффекта при рассеянии электрона на «голом» ядре в монохроматическом внешнем поле в приближении прямопролетных траекторий.

В низкочастотном пределе $\zeta = \omega\rho/v < 1$, когда $F(\zeta) \approx 1$ и $F'(\zeta) \approx 0$, формула (11.38) упрощается к виду:

$$\sigma(\omega, v) \approx \pi \left(\frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \left[\frac{eE_0 \sin \alpha}{m\omega^2} \right]^2 \ln \left(\frac{mv\rho_{\max}}{\hbar} \right). \quad (11.39)$$

Таким образом, вынужденный тормозной эффект в низкочастотном диапазоне $\omega < v/\rho$ максимален для излучения, поляризованного перпендикулярно скорости налетающей частицы. Приближение (11.39) становится неадекватным для малых углов α , когда

вектор напряженности поля излучения параллелен вектору скорости рассеивающегося электрона. В случае $\alpha \approx 0$ нужно пользоваться формулой (11.38).

Сечения (11.38) и (11.39) описывают как излучение, так и поглощение фотона, т. е. прямой и обратный тормозной эффект. Таким образом, в рамках нашего приближенного рассмотрения эти сечения равны между собой. На самом деле сечения прямого и обратного тормозного эффекта отличаются друг от друга, если учесть изменение импульса рассеивающейся частицы.

Формулу для сечения поляризационного вынужденного тормозного эффекта можно вывести аналогичным способом, исходя из аналога равенства (11.21) для фиксированной поляризации излучения. Соответствующее выражение можно выписать сразу, если произвести замену $Z \rightarrow Z_{\text{pol}}(\omega)$ [см. определение (11.30)] и $\rho_{\text{min}} \rightarrow \tilde{\rho}_{\text{min}}$:

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{PB}}(\omega, v) &= & (11.40) \\ &= 2\pi \left(\frac{eE_0}{\hbar v} \right)^2 |\beta(\omega)|^2 \int_{\tilde{\rho}_{\text{min}}}^{\tilde{\rho}_{\text{max}}} \frac{d\rho}{\rho} \left\{ F^2 \left(\frac{\omega\rho}{v} \right) \frac{\sin^2 \alpha}{2} + F'^2 \left(\frac{\omega\rho}{v} \right) \cos^2 \alpha \right\}, \end{aligned}$$

где

$$\tilde{\rho}_{\text{min}} = r_u; \quad \tilde{\rho}_{\text{max}} = \frac{v}{\omega},$$

так же как и в случае спонтанного поляризационного тормозного излучения (11.26). Сечение (11.40) описывает как излучение, так и поглощение фотона аналогично сечению статического канала (11.33).

Вынужденный поляризационный тормозной эффект можно трактовать как рассеяние электрона на зависящем от времени поляризационном потенциале, наведенном электромагнитным излучением в атоме-мишени.

Поучительно вывести формулу для вынужденного поляризационного тормозного эффекта в первом борновском приближении в рамках квантово-механического подхода. Для этого рассмотрим диаграммы Фейнмана, отвечающие вынужденному поляризационному тормозному эффекту. Они изображены на рис. 11.4 для излучения фотона. На этом рисунке двойные сплошные линии описывают атом, одинарные сплошные линии соответствуют рассеиваемому электрону. В борновском приближении, когда движение налетающей

частицы до и после столкновения можно считать невозмущенным [см. условие (11.19)], волновые функции электрона представляют собой плоские волны. Если изменение импульса достаточно мало: $|\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i| \ll |\mathbf{p}_i|$, то для изменения энергии электрона справедливо приближенное равенство: $\varepsilon_f - \varepsilon_i \cong \hbar \mathbf{q} \mathbf{v} \equiv \hbar q^0$, где $\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i$ — переданный от налетающей частицы атому импульс (или просто переданный импульс). Таким образом, мы определили четырехмерный волновой вектор $q = (q^0, \mathbf{q})$, описывающий (с точностью до постоянной Планка) изменение энергии-импульса налетающей частицы.

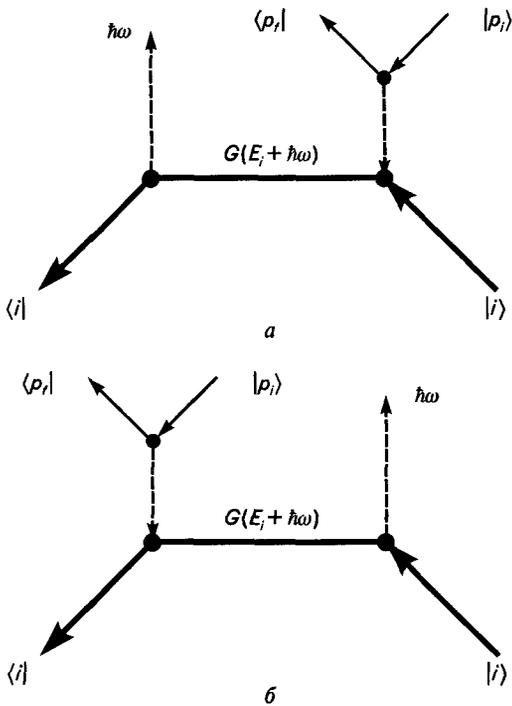


Рис. 11.4. Диаграммы Фейнмана, описывающие поляризационный тормозной эффект

В диаграммах рис. 11.4 присутствует новый элемент: фотонная (штриховая) линия, соединяющая вершины. Этот элемент называется *фотонной функцией Грина*, или *фотонным пропагатором*. Он описывает распространение собственного электромагнитного поля заряженной частицы (виртуального фотона) из одной пространствен-



ной точки в другую. В соответствии с изложенными в разд. 6.5 правилами диаграммной техники штриховая линия, идущая от вершины, связанной с дипольным моментом электрона, описывает комплексную амплитуду напряженности его электрического поля. Для напряженности электрического поля, возникающего в результате рассеяния нерелятивистского электрона, имеем (нормировочный объем в определении его волновой функции положен равным единице):

$$\mathbf{E}^{(p)}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e q}{q^2} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \equiv \mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (11.41)$$

где $\mathbf{q} = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)/\hbar$; $\mathbf{p}_{i,f}$ — начальный и конечный импульсы электрона, рассеивающегося на атоме. Амплитуда напряженности $\mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q})$ представляет собой пространственный Фурье-образ кулоновского поля точечного заряда в соответствии с тем, что волновые функции налетающего электрона в борновском приближении являются плоскими волнами. В отличие от свободного излучения (реального фотона) в формуле (11.41), вообще говоря, нельзя пренебречь экспонентой, описывающей пространственное изменение поля рассеянного электрона (виртуального фотона). Действительно, показатель экспоненты в правой части (11.41) в случае быстрой налетающей частицы ($\mathbf{p}_i r_a \gg \hbar$) может быть немалой величиной $qr_a > 1$ для достаточно больших углов рассеяния. Тогда учет пространственного изменения поля $\mathbf{E}^{(p)}$ весьма существен.

Выпишем аналитическое выражение для амплитуды поляризационного тормозного эффекта, пользуясь диаграммами рис. 11.4. С помощью правил диаграммной техники, изложенных в разд. 6.5, находим:

$$A_{fi}^{(PB)} = \frac{1}{2\hbar} \left\{ \langle i | \mathbf{E}_0 \hat{\mathbf{d}} G(E_i + \hbar\omega) \hat{\mathbf{d}} \mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | i \rangle + \langle i | \mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{d}} G(E_i - \hbar\omega) \hat{\mathbf{d}} \mathbf{E}_0 | i \rangle \right\}, \quad (11.42)$$

где амплитуда поля $\mathbf{E}_0^{(p)}$, создаваемого налетающим электроном, определяется из второго равенства (11.41). При записи (11.42) предполагалось, что состояние атома в результате тормозного эффекта не изменяется. Это предположение отвечает умеренным волновым векторам виртуального фотона $|\mathbf{q}| \leq r_a^{-1}$. В противном случае будут преобладать процессы с ионизацией атома электронным ударом.

Выражение для амплитуды поляризационного тормозного эффекта (11.42) соответствует его интерпретации как процесса рассеяния виртуального фотона собственного поля налетающей частицы в реальный фотон на атоме. Действительно, формула (11.42) перейдет в выражение (8.24) для амплитуды рассеяния фотона, если в матричном элементе \tilde{V}_{ni} под оператором взаимодействия понимать взаимодействие атома с виртуальным фотоном из поля рассеивающей частицы (11.41).

Для дальнейших преобразований нужно воспользоваться выражением для функции Грина атома (6.35). Из него следует, что в амплитуде рассматриваемого процесса появляются матричные элементы вида $\langle n | \hat{d} e^{-iqr} | i \rangle$ и их комплексно сопряженные. В случае больших значений $|\mathbf{q}| > r_a^{-1}$ эти матричные элементы малы для состояний $|n\rangle$, принадлежащих дискретному энергетическому спектру атома. Данная малость возникает из-за сильных осцилляций подынтегрального выражения в рассматриваемом матричном элементе. Если же $|\mathbf{q}| \leq r_a^{-1}$, то $\exp(iqr) \approx 1$, поэтому справедливо приближенное равенство:

$$\langle n | \hat{d} e^{-iqr} | i \rangle \approx \langle n | \hat{d} | i \rangle \theta(r_a^{-1} - |\mathbf{q}|), \quad (11.43)$$

где $\theta(x)$ — «единичная ступенька» (функция Хэвисайда).

Соотношение (11.43) называется *приближением Борна—Бете* в теории столкновительных процессов. Используя его, вместо (11.42) можно получить:

$$A_{fi}^{(\text{PB})}(\mathbf{q}) \equiv \frac{2i\pi e}{\hbar q^2} (E_0 \mathbf{q}) \beta_i(\omega) \theta(r_a^{-1} - |\mathbf{q}|), \quad (11.44)$$

где $\beta_i(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома, для которой справедливо выражение (8.32). При выводе (11.44) предполагалось, что состояние атома сферически-симметрично, и была учтена формула (11.41). Для получения вероятности поляризационного тормозного эффекта, нужно просуммировать по состояниям рассеянного электрона, принадлежащим непрерывному спектру. Это суммирование можно заменить интегрированием по волновому вектору виртуального фотона с помощью соотношения

$$\sum_{\mathbf{p}_f} \dots \rightarrow \int \dots \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}. \quad (11.45)$$

Здесь нормировочный объем, фигурирующий в определении волновых функций электрона (плоских волн), положен равным единице. Соотношение (11.45) является следствием однозначной связи векторов \mathbf{p}_f и $\mathbf{q} = (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)/\hbar$, если начальный импульс электрона \mathbf{p}_i фиксирован.

Таким образом, выражение для вероятности (в единицу времени) рассматриваемого процесса через его амплитуду имеет вид:

$$w_{fi}^{(PB)} = 2\pi \int \delta(\omega + q^0) |A_{fi}^{(PB)}(\mathbf{q})|^2 \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}, \quad (11.46)$$

где частота виртуального фотона равна: $q^0 \equiv \mathbf{q}\mathbf{v}$ по предположению о слабом возмущении движения электрона в ходе рассеяния. Для того чтобы учесть различие между сечениями вынужденного тормозного излучения и вынужденного тормозного поглощения, необходимо использовать точную формулу для q^0 :

$$q^0 = \frac{p_f^2 - p_i^2}{2m\hbar}.$$

Это, однако, приводит к весьма громоздким выражениям, так что мы в дальнейшем ограничимся приближением $q^0 \approx \mathbf{q}\mathbf{v}$. Подставляя (11.44) в (11.46) и используя связь между вероятностью в единицу времени и сечением процесса, находим:

$$\sigma^{PB}(\omega, v) = 2\pi \left(\frac{eE_0}{\hbar v} \right)^2 |\beta(\omega)|^2 \times \int_{\omega/v}^{r_d^{-1}} \frac{dq}{q} \left\{ \frac{\sin^2 \alpha}{2} \left[1 - \left(\frac{\omega}{qv} \right)^2 \right] + \cos^2 \alpha \left(\frac{\omega}{qv} \right)^2 \right\}, \quad (11.47)$$

где α — угол между векторами \mathbf{v} и \mathbf{E}_0 . Нижний предел интегрирования в (11.47) определяется законом сохранения энергии, а верхний предел — отвечает приближению Бете (11.43). В полученном выражении множитель перед интегралом совпадает с соответствующей величиной в классическом сечении (11.40). Интеграл в правой части равенства (11.47) легко вычисляется [в отличие от классической формулы (11.40)]. В спектральной области $\omega < v/r_d$ для сечения

вынужденного тормозного эффекта по поляризационному каналу получаем

$$\sigma^{PB}(\omega, v) \equiv \pi \left(\frac{eE_0 |\beta(\omega)|}{\hbar v} \right)^2 \left\{ \sin^2 \alpha \ln \left(\frac{v}{\omega r_a} \right) + \cos^2 \alpha \right\}. \quad (11.48)$$

При выводе (11.48) было пренебрежено слагаемыми $(\omega r_a/v)^2$ по сравнению с единицей и единицей по сравнению с большим логарифмом (логарифмическая точность). Косинус в фигурных скобках (11.48) оставлен, чтобы учесть случай малых углов α , когда электрическое поле в излучении поляризовано параллельно вектору скорости рассеивающегося электрона.

В высокочастотном диапазоне $\omega > v/r_a$ приближение Бете (11.43) оказывается недостаточным. Тогда нужно более детально учитывать электронную структуру атома. В борновском приближении это делается с помощью введения атомного форм-фактора $F_a(\mathbf{q})$, который представляет собой Фурье-образ пространственного распределения электронной плотности.

11.3. РЕЗОНАНСНЫЙ ТОРМОЗНОЙ ЭФФЕКТ

При расчете тормозного эффекта на нейтральных атомах можно пренебречь интерференцией статического и поляризационного каналов, поскольку амплитуды этих каналов существенны в различных областях значений прицельного параметра ρ (или переданных импульсов $\hbar|\mathbf{q}|$). Для статического канала прицельный параметр мал $\rho < r_a$, иначе поле атома и ускорение рассеивающегося заряда равны нулю. В случае поляризационного канала основной вклад в излучение дают траектории с большой величиной параметра ρ : $\rho > r_a$, иначе мал наведенный в электронном остове атома переменный дипольный момент, являющийся источником излучения.

Ситуация изменяется при переходе к тормозному эффекту на ионах, обладающих системой связанных электронов (электронным остовом). Тогда межканальная интерференция может играть существенную роль особенно для процессов с большим изменением энергии рассеивающегося электрона. В ходе таких сильно неупругих процессов излучение фотона как реального, так и виртуального происходит в области наибольшего сближения электрона и иона-мише-



ни, при этом реализуются наиболее благоприятные условия для межканальной интерференции. Описанная ситуация характерна для высокотемпературной плазмы с многозарядными ионами $Z_i \gg 1$. В этом случае выполняется неравенство, обратное борновскому условию (11.19):

$$\frac{Z_i e^2}{\hbar v} > 1. \quad (11.49)$$

Здесь скорость v по порядку величины равна средней тепловой скорости электронов плазмы. Неравенство (11.49) отвечает квазиклассическому приближению, когда движение электрона можно описывать в рамках классического подхода. Сильно неупругие процессы соответствуют излучению высоких частот $\omega > \omega_c = v/a_c$ (ω_c — так называемая кулоновская частота; $a_c = Z_i e^2/mv^2$ — кулоновская длина), когда электрон движется по сильно изогнутой траектории. Эта область параметров задачи называется крамерсовской, в ней «работает» формула для сечения статического тормозного излучения (11.17).

Выражение для полного сечения тормозного эффекта (с учетом интерференции статического и поляризационного каналов) имеет наиболее простой вид, если пренебречь проникновением рассеивающегося электрона в овал иона-мишени. Это отвечает дипольному приближению по виртуальному фотону или (что то же самое) *приближению точечного иона*. С формальной точки зрения дипольное приближение по виртуальному фотону соответствует отсутствию экспоненциального множителя в выражении (11.41). Этот множитель описывает пространственное изменение электрического поля рассеивающегося электрона. Выпишем формулу для сечения в резонансном случае, когда частота излучения близка к одной из собственных частот системы связанных электронов иона $\omega \cong \omega_0$ (*резонансный тормозной эффект*). В резонансном тормозном эффекте интерференционные особенности проявляются наиболее ярко. Усредненное по направлениям начальной скорости электрона сечение рассматриваемого процесса имеет вид:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2\sqrt{\pi}}{3\sqrt{3}} Z_i^2 \left| 1 - \frac{\omega f_0 \operatorname{sgn}(\Delta)}{4Z_i \Omega(\Delta, E_0)} \right|^2 \left(\frac{eE_0}{m\omega^2} \right)^2, \quad (11.50)$$

где $\Delta = \omega_0 - \omega$ — частотная отстройка от резонанса; $\operatorname{sgn}(x)$ — функция знака (равна единице при $x \geq 0$ и минус единице, если $x < 0$);

$\Omega(\Delta, E_0)$ — частота Раби, выраженная через силу осциллятора резонансного перехода в ионном остове f_0 ,

$$\Omega(\Delta, E_0) = \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + \frac{3f_0 e^2 E_0^2}{8m\hbar\omega_0}}. \quad (11.51)$$

Здесь и далее предполагаем, что резонансный переход имеет вид: $n_i s \rightarrow n p$.

Равенство (11.50) получено в пренебрежении затуханием резонансного перехода, но с учетом его полевого уширения. Полевое уширение связано с уменьшением времени жизни верхнего энергетического уровня резонансного перехода за счет индуцированных излучением переходов на нижний уровень. Этому типу уширения отвечает второе слагаемое под знаком корня в правой части равенства (11.51), представляющее собой резонансную частоту Раби Ω_0 . Оно играет существенную роль в случае малых отстроек от резонанса: $|\Delta| < \Omega_0$.

Первое слагаемое под знаком модуля в формуле (11.50) отвечает статическому каналу тормозного эффекта, второе слагаемое соответствует поляризационному каналу. Видно, что характер межканальной интерференции зависит от знака частотной отстройки Δ . Если $\Delta > 0$ ($\omega < \omega_0$), интерференция амплитуд двух каналов тормозного эффекта носит деструктивный характер: она уменьшает полное сечение процесса. Для частот излучения $\omega > \omega_0$ интерференция является конструктивной: полное сечение увеличивается. Как следует из формулы (11.50), в приближении точечного иона деструктивная межканальная интерференция может полностью «занулить» сечение тормозного эффекта в случае выполнения неравенства:

$$I = c \frac{E_0^2}{8\pi} < \frac{f_0 \hbar \omega_0^2}{24 r_0 \lambda_0}, \quad (11.52)$$

где $r_0 = e^2/mc^2$ — классический радиус электрона; $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ — резонансная длина волны. Условие (11.52) накладывает ограничение на интенсивность излучения, «насыщающего» резонансный переход и уменьшающего тем самым вклад поляризационного канала в полную амплитуду процесса. Обращение сечения в ноль говорит о полной взаимной компенсации вкладов статического и поляризационного каналов в полное сечение процесса в низкочастотной окрестности резонанса $\omega < \omega_0$.

Приведенная картина резонансного тормозного эффекта на самом деле является весьма грубой, она отражает качественные черты рассматриваемого явления в нулевом приближении. Чтобы получить более реалистическое описание, необходимо учесть проникновение рассеивающегося электрона в остов иона-мишени. Понятно, что это проникновение будет увеличивать амплитуду статического канала и уменьшать амплитуду поляризационного канала. Кроме того, и это особенно важно, учет проникновения налетающей частицы в ионный остов приводит к зависимости интерференционного слагаемого от прицельного параметра ρ , что, как это будет показано ниже, уменьшает роль межканальной интерференции.

Влияние проникновения налетающего электрона в остов мишени на тормозной эффект можно учесть, если воспользоваться приближением классического кулоновского тока. Это приближение адекватно случаю высокотемпературной плазмы с многозарядными ионами $Z_i \gg 1$, когда выполняется условие квазиклассичности (11.49), и движение налетающей частицы происходит в электрическом поле, близком к кулоновскому. Тогда инфинитное движение электрона происходит по гиперболе, параметры которой определяются начальной скоростью (на бесконечности) v_i и прицельным параметром ρ . Дифференциальное сечение вынужденного тормозного эффекта в рассматриваемом приближении имеет вид:

$$d\sigma_{\text{tot}}(\omega, \rho, \varphi) = \frac{1}{4\hbar^2} |E_0 \mathbf{d}_{\text{tot}}(\omega, \rho)|^2 \rho d\rho d\varphi, \quad (11.53)$$

где $\mathbf{d}_{\text{tot}}(\omega, \rho)$ — полный излучающий момент системы «налетающий электрон + ион-мишень»,

$$\mathbf{d}_{\text{tot}}(\omega, \rho) = e\mathbf{r}(\omega, \rho) + \mathbf{d}_i(\omega, \rho); \quad (11.54)$$

φ — угол между плоскостью орбиты и вектором напряженности электрического поля в излучении E_0 (азимутальный угол). Первое слагаемое в (11.54) отвечает компоненте Фурье дипольного момента электрона (статический канал), второе слагаемое соответствует компоненте Фурье дипольного момента, наведенного электроном в ионном остове (поляризационный канал). Движение рассеивающегося электрона в данном случае удобно описывать с помощью фокальной системы координат, лежащей, естественно, в плоско-

сти орбиты. Два базисных вектора этой системы определяются равенствами:

$$\mathbf{e}_y = \frac{\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_f}{2 \cos(\vartheta/2)}; \quad \mathbf{e}_x = \frac{\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_f}{2 \sin(\vartheta/2)}, \quad (11.55)$$

где

$$\mathbf{e}_i = \frac{\mathbf{v}_i}{v_i}; \quad \mathbf{e}_f = \frac{\mathbf{v}_f}{v_f};$$

ϑ — угол рассеяния электрона,

$$\vartheta = 2 \operatorname{arctg} \left(\frac{a_C}{\rho} \right);$$

a_C — кулоновская длина,

$$a_C = \frac{Z_i e^2}{m v_i^2}.$$

Интегрирование в правой части равенства (11.53) по азимутальному углу φ дает:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}}(\omega, \alpha) &= \frac{\pi}{2\hbar^2} a_C^2 E_0^2 \times \\ &\times \int_0^\infty \left\{ \left| d_{\text{tot}, x}(\omega, \rho) \right|^2 f_x(\alpha, \rho) + \left| d_{\text{tot}, y}(\omega, \rho) \right|^2 f_y(\alpha, \rho) \right\} \frac{\rho d\rho}{a_C^2 + \rho^2}, \end{aligned} \quad (11.56)$$

где $f_x(\alpha, \rho)$, $f_y(\alpha, \rho)$ — безразмерные функции прицельного параметра ρ и угла α между вектором начальной скорости и вектором электрического поля \mathbf{E}_0 в излучении,

$$f_x(\alpha, \rho) = \cos^2 \alpha + \frac{\rho^2}{2a_C^2} \sin^2 \alpha; \quad (11.57)$$

$$f_y(\alpha, \rho) = \frac{\rho^2}{a_C^2} \cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha. \quad (11.58)$$

Компонента Фурье радиуса-вектора рассеивающегося электрона $\mathbf{r}(\omega, \rho)$, определяющая сечение статического канала, имеет стандартный вид:

$$x(\omega, \rho) = \frac{\pi a_c}{\omega} H_{i\omega/\omega_c}^{(1)'} \left[i \frac{\omega}{\omega_c} \sqrt{1 + \left(\frac{\rho}{a_c} \right)^2} \right]; \quad (11.59)$$

$$y(\omega, \rho) = -\frac{\pi \rho a_c}{\omega \sqrt{a_c^2 + \rho^2}} H_{i\omega/\omega_c}^{(1)} \left[i \frac{\omega}{\omega_c} \sqrt{1 + \left(\frac{\rho}{a_c} \right)^2} \right], \quad (11.60)$$

где $H_{i\omega/\omega_c}^{(1)}$ — функция Ганкеля первого рода ранга $i\omega/\omega_c$; штрих в формуле (11.59) означает дифференцирование по аргументу.

Компонента Фурье дипольного момента $\mathbf{d}_i(\omega, \rho)$, наведенного в остове иона, в используемом приближении равна:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_i(\omega, \rho) = \\ = \frac{d_0 e^2}{4\sqrt{3}\pi\hbar\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \frac{\mathbf{r}(t, \rho)}{r(t, \rho)} \langle n, p | a_1[r_c, \mathbf{r}(t, \rho)] | n_i, s \rangle, \end{aligned} \quad (11.61)$$

где $\mathbf{r}(t, \rho)$ — радиус-вектор рассеивающегося электрона; r_c — модуль радиуса-вектора электрона ионного остова (предполагаем для простоты, что в ионе-мишени один электрон на внешней оболочке); d_0 — дипольный момент резонансного перехода; Ω — частота Раби; $|n_i, s\rangle, |n, p\rangle$ — векторы состояний связанного электрона ионного остова;

$$a_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \theta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\mathbf{r}}{r^2} + \theta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \frac{\mathbf{r}'}{r'^2}. \quad (11.62)$$

В матричном элементе $\langle n, p | a_1[r_c, \mathbf{r}(t, \rho)] | n_i, s \rangle$ предполагается интегрирование только по модулю радиуса-вектора r_c внешнего электрона в ионном остове, интегрирование по угловым переменным уже проведено.

Используем формулы (11.56)—(11.62) для расчета полного сечения вынужденного тормозного эффекта при рассеянии электрона с начальной скоростью $1,3 \cdot 10^8$ см/с на литиеподобном ионе азота N^{4+} . Литиеподобность означает, что электронная структура иона такая

же, как в нейтральном атоме лития. Легко проверить, что в рассматриваемом случае борновский параметр, фигурирующий в неравенствах (11.19) и (11.49),

$$\frac{Z_i e^2}{\hbar v} \cong 6,7,$$

так что квазиклассическое условие (11.49) выполнено. Предполагается, что частота излучения близка к частоте перехода $2s \rightarrow 2p$ в ионном остове, а интенсивность резонансного излучения $I \approx 3 \cdot 10^{10}$ Вт/см². Результаты вычислений полного сечения, нормированного на сечение статического канала, для двух поляризаций излучения представлены на рис. 11.5.

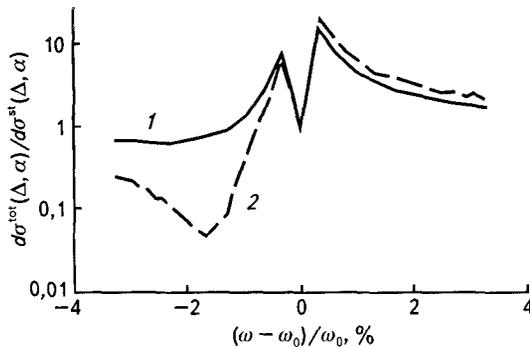


Рис. 11.5. Нормированное сечение вынужденного тормозного эффекта при рассеянии квазиклассического электрона на ионе N^{4+} вблизи собственной частоты перехода $2s \rightarrow 2p$ в остове мишени для двух значений угла α :

1 — $\alpha = 0$; 2 — $\alpha = \pi/2$

Приведенный рисунок демонстрирует сильную зависимость интерференционных эффектов от поляризации резонансного излучения. (Эта зависимость отсутствует в формуле (11.50), выведенной без учета проникновения налетающей частицы в электронный остов мишени.) В случае параллельной ориентации поля E_0 по отношению к вектору начальной скорости рассеивающегося электрона ($\alpha = 0$) интерференционные эффекты сильно редуцированы. Если же $\alpha = \pi/2$ (перпендикулярная поляризация) межканальная интерференция весьма существенна, что особенно сильно проявляется в низкочастотном крыле $\omega < \omega_0$, где полное сечение процесса уменьшается примерно



на порядок величины. В высокочастотном крыле линии влияние поляризации излучения на межканальную интерференцию незначительно. Хотя деструктивная интерференция вкладов статического и поляризационного каналов в полное сечение тормозного эффекта весьма велика, она все же не дает полного «зануления» сечение процесса, как это предсказывается дипольной формулой (11.50).

Причина поляризационных особенностей в спектральном сечении тормозного эффекта связана с разным влиянием проникновения электрона в остов мишени на фокальные компоненты наведенного дипольного момента $(d_i)_{x,y}$. Расчет зависимостей этих компонент от прицельного параметра показывает, что для случая, изображенного на рис. 11.5, y -проекция близка к своему дипольному аналогу. В то же время x -проекция дипольного момента для близких соударений ($\rho < a_c$) сильно отличается от вычисленной в дипольном приближении. В частности, для некоторого значения прицельного параметра x -проекция наведенного в остове дипольного момента обращается в ноль и при $\rho \rightarrow 0$ меняет знак. Как следует из формул (11.56)–(11.58), в при параллельной поляризации излучения ($\alpha = 0$) основной вклад в процесс дает $(d_i)_x$ -компонента. Действительно, тогда $f_x \approx 1, f_y \approx 0$, поскольку в крамерсовском пределе существенны $\rho < a_c$. При перпендикулярной поляризации ($\alpha = \pi/2$), напротив, $f_x \approx 0, f_y \approx 1$, и основную роль играет $(d_i)_y$ -компонента, на которую слабо влияют эффекты проникновения. Но в пренебрежении проникновением рассеивающегося электрона в остов иона-мишени межканальная интерференция очень существенна, как это следует из формулы (11.55). Таким образом, в случае $\alpha = \pi/2$ интерференционные эффекты должны быть проявлены, а в случае $\alpha = 0$ — редуцированы, что и демонстрирует рис. 11.5.

С ростом интенсивности резонансного излучения «провал» на спектральной зависимости сечения (см. рис. 11.5) будет сдвигаться к центру линии, поскольку при этом из-за эффекта насыщения амплитуда поляризационного канала (на фиксированной частоте) будет уменьшаться.

Таким образом, в вынужденном тормозном эффекте на ионах с электронным остовом вклад поляризационного канала в сечение приводит к асимметричной резонансной структуре при приближении частоты излучения к одной из собственных частот ионного остова. Спектральная асимметрия сечения вызвана межканальной интерференцией и существенно зависит от поляризации резонансного

излучения. Из проведенного рассмотрения также следует, что в случае резонансного *спонтанного* тормозного излучения электронов на ионах в низкочастотном крыле линии излучение будет преимущественно поляризовано вдоль начальной скорости электрона.

11.4. ИЗЛУЧЕНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ НА АТОМНЫХ КЛАСТЕРАХ

Рассмотрим сначала поляризационное тормозное излучение, возникающее в результате неупругого рассеяния *релятивистской* заряженной частицы на изолированном атоме. Чтобы записать выражение для его амплитуды, воспользуемся диаграммами рис. 11.4, описывающими данный процесс в борновском приближении по взаимодействию налетающей частицы с электронным остовом атома-мишени. В релятивистском случае, когда $v \approx c$, условие применимости борновского приближения (11.19) выполняется вплоть до высоких значений зарядовых чисел сталкивающихся частиц. Как уже отмечалось, поляризационное тормозное излучение можно описать как рассеяние виртуального фотона собственного поля рассеивающегося заряда в реальный фотон на связанных электронах мишени. В рассматриваемой ситуации формула (11.41) для напряженности электрического поля виртуального фотона «не работает», нужно корректно учесть релятивизм налетающей частицы. Воспользуемся для этого уравнениями Максвелла, записанными для плоских волн. Подставляя напряженность магнитного поля из первого уравнения в третье (нумерация уравнений Максвелла взята из т. 2 курса теоретической физики Л.Л. Ландау и Е.М. Лифшица), получаем равенство для определения напряженности поля виртуального фотона E_p :

$$\left\{ k_i k_j + \delta_{ij} \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right) \right\} E_j^{(p)}(\omega, \mathbf{k}) = -i \frac{4\pi\omega}{c^2} j_i(\omega, \mathbf{k}), \quad (11.63)$$

где $j_i(\omega, \mathbf{k})$ — пространственно-временная компонента Фурье плотности тока рассеивающейся заряженной частицы. Решение уравнения (11.63) имеет вид:

$$E^{(p)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \frac{\{ \mathbf{j}(\omega, \mathbf{k}) - (c/\omega)^2 \mathbf{k} [\mathbf{k} \mathbf{j}(\omega, \mathbf{k})] \}}{k^2 - (\omega/c)^2}. \quad (11.64)$$

При рассеянии электрона $\varepsilon_i, \mathbf{p}_i \rightarrow \varepsilon_f, \mathbf{p}_f$ с изменением энергии $\varepsilon_f - \varepsilon_i \equiv \hbar q^0$ и импульса $\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i \equiv \hbar \mathbf{q}$ в формуле (11.64) нужно произвести замену $\omega \rightarrow -q^0$ и $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{q}$. Выражение (11.64) можно упростить, если воспользоваться приближенным равенством для Фурье-образа плотности тока:

$$\mathbf{j}(q^0, \mathbf{q}) \approx e_p v \delta(q^0 - \mathbf{q}v), \quad (11.65)$$

которое справедливо в случае слабого возмущения движения рассеивающейся частицы:

$$\hbar |\mathbf{q}| \equiv |\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i| \ll |\mathbf{p}_{i,f}|.$$

При записи (11.65) нормировочный объем положен равным единице. Используя (11.65), из формулы (11.64) получаем для напряженности электрического поля в точке \mathbf{r} :

$$E^{(p)}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = 4\pi i e_p \frac{\mathbf{q} - (\mathbf{q}v/c^2)v}{q^2 - (\mathbf{q}v/c)^2} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (11.66)$$

Формула (11.66) описывает электрическое поле виртуального фотона, который возникает в результате рассеяния заряженной частицы. Заметим, что в нерелятивистском пределе $v = c$ равенство (11.66) переходит в выражение (11.41). В релятивистском случае нужно также учитывать пространственную зависимость поля излучения (реального фотона), т. е. писать $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$ вместо постоянного значения \mathbf{E}_0 . Минус в показателе экспоненты $\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$ отвечает отрицательно-частотной составляющей поля, которая ответственна за *излучение* фотона. Напомним, что положительно-частотная составляющая электромагнитного поля вызывает *поглощение* фотона. С учетом сказанного амплитуда поляризованного тормозного излучения (11.42) переписывается в виде:

$$A_{fi}^{(PB)} = \frac{1}{2\hbar} \left\{ \langle i | \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{d}}G(E_i + \hbar\omega) \hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | i \rangle + \right. \\ \left. + \langle i | \mathbf{E}_0^{(p)}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{d}}G(E_i - \hbar\omega) \hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | i \rangle \right\} = \frac{1}{2\hbar} E_0^i E_0^{(p)s} c_{ii}^{ls}(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (11.67)$$

где $c_{ii}^{ls}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ — тензор рассеяния электромагнитного поля на атоме, учитывающий неоднородность поля. Он является обобщением сво-

его дипольного аналога (8.31) для рассеяния без изменения атомного состояния $|i\rangle = |f\rangle$. Дальнейший расчет проведем в следующем приближении:

$$c_{ii}^{fs}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \rightarrow \delta^{fs} \beta_i(\omega) \tilde{F}_{ii}(\mathbf{k} + \mathbf{q}), \quad (11.68)$$

где $\tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}_1)$ — атомный форм-фактор, нормированный на число электронов, которое в случае нейтрального атома равняется зарядовому числу ядра Z ,

$$\tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}_1) = Z^{-1} \langle i | \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_j} | i \rangle. \quad (11.69)$$

Атомный форм-фактор представляет собой Фурье-образ электронной плотности и соответственно описывает ее пространственное распределение.

Соотношение (11.68) называется мультипликативным приближением, в нем частотная зависимость определяется динамической поляризуемостью атома $\beta_i(\omega)$, а зависимость от переданного волнового вектора ($\mathbf{q}_1 \equiv \mathbf{k} + \mathbf{q}$) описывается нормированным форм-фактором (11.69). Можно показать, что соотношение (11.68) является точным в пределе высоких частот $\omega \gg \omega_a$, где ω_a — характерная собственная частота атома для переходов в дискретном спектре. Действуя в полной аналогии с выводом нерелятивистского сечения поляризованного тормозного эффекта (11.47), находим:

$$d\sigma^{\text{PB}} = \frac{\delta(\omega + \mathbf{q}\mathbf{v})}{2\hbar^2 v} \left| \left(\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_0^{(p)} \right) \right|^2 \left| \beta_i(\omega) \tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}_1) \right|^2 \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}. \quad (11.70)$$

Чтобы перейти от сечения вынужденного излучения (11.70) к спонтанному процессу, нужно в формуле (11.70) произвести замену (11.37). Суммируя полученное выражение по поляризациям излучаемого фотона и пользуясь формулой (11.66) для поля налетающей частицы, приходим к равенству:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} &= \\ &= \frac{\omega^3 e_p^2}{\pi^2 \hbar v c^3} \delta(\omega + \mathbf{q}\mathbf{v}) \frac{\left[\mathbf{n}, \mathbf{q} + (\omega/c^2) \mathbf{v} \right]^2}{\left[\mathbf{q}^2 - (\omega/c)^2 \right]^2} \left| \beta_i(\omega) \tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}_1) \right|^2 d\Omega_k d\mathbf{q}, \end{aligned} \quad (11.71)$$

где $d\Omega_k$ — элемент телесного угла в направлении волнового вектора излучаемого фотона. Полученное сечение является дифференциальным по частоте, углу вылета фотона и углу рассеяния электрона.

В частотном диапазоне $\omega < v/r_a$ «работает» приближение Борна—Бете (11.43), и можно пренебречь волновым вектором фотона в аргументе атомного форм-фактора, т. е. справедливо приближенное равенство:

$$\tilde{F}_{ii}(\mathbf{q}_1) \approx \theta \left(r_a^{-1} - |\mathbf{q}| \right). \quad (11.72)$$

Используя (11.72), можно проинтегрировать сечение (11.71) по волновому вектору \mathbf{q} , в результате получается сечение поляризационного тормозного излучения, дифференциальное по частоте и углу вылета фотона:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega d\Omega_k} = & \quad (11.73) \\ = & \frac{e_p^2 \omega^3 |\beta_i(\omega)|^2}{\pi \hbar v^2 c^3} \left\{ \left(1 + \cos^2 \theta \right) \ln \left(\frac{v\gamma}{\omega r_a} \right) - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \sin^2 \theta + \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{2} \right\}, \end{aligned}$$

где θ — угол между вектором скорости рассеивающейся частицы и волнового вектора фотона; γ — релятивистский фактор Лоренца,

$$\gamma = \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right]^{-1/2}.$$

Формула (11.73) выведена в области относительно низких частот $\omega < v/r_a$. Это неравенство дает следующее ограничение на энергию тормозного фотона (в модели Томаса—Ферми для среднего атомного радиуса) $\hbar\omega < 4, 2\sqrt[3]{Z}$ кэВ. Таким образом, выражение (11.73) адекватно описывает спектрально-угловые характеристики рассматриваемого процесса в диапазоне $\hbar\omega \leq 10$ кэВ. В высокочастотной области $\hbar\omega > 10$ кэВ ($\omega > v/r_a$) приближение (11.72) оказывается недостаточным: необходимо учитывать волновой вектор фотона в аргументе атомного форм-фактора.

В логарифмическом приближении (когда можно пренебречь другими слагаемыми в фигурных скобках (11.73) по сравнению с большим логарифмом) угловая зависимость сечения поляризационного

тормозного излучения *релятивистской* заряженной частицы описывается дипольным множителем $1 + \cos^2 \theta$. Это находится в резком контрасте с известным фактом узкой направленности статического тормозного излучения релятивистской частицы. Указанное различие связано с тем, что поляризационный канал обусловлен рассеянием собственного поля заряженной частицы на нерелятивистских атомных электронах, поэтому угол излучения слабо влияет на вероятность процесса. В случае же статического канала угол излучения весьма существен, если частица релятивистская. Действительно, при излучении фотона вероятность процесса пропорциональна квадрату так называемой когерентной длины l_c , которую можно определить как расстояние, на котором поле фотона «отрывается» от собственного поля излучающей частицы. Это расстояние равно:

$$l_c = \frac{\lambda}{1 - (v/c) \cos \theta}, \quad (11.74)$$

где λ — длина волны; θ — угол излучения. Из формулы (11.74) видно, что для $v \approx c$ когерентная длина, а с ней и вероятность излучения резко растут на малых углах $\theta \rightarrow 0$. В нерелятивистском пределе $v \ll c$ вне зависимости от величины угла θ формула (11.74) дает: $l_c \approx \lambda$, так что острая направленность излучения отсутствует.

Спектральное сечение рассматриваемого процесса получается после интегрирования (11.73) по углу излучения фотона. В результате в диапазоне $\omega < v/r_a$ имеем:

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega} = \frac{16\omega^3 e_p^2 |\beta_i(\omega)|^2}{3\hbar v^2 c^3} \left\{ \ln \left(\frac{v\gamma}{\omega r_a} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right\}. \quad (11.75)$$

Как видно из (11.75), спектральное сечение поляризационного тормозного излучения логарифмически возрастает с увеличением фактора Лоренца γ , т. е. ростом энергии релятивистской частицы ($\varepsilon = \gamma mc^2$). Это обстоятельство становится понятным, если учесть, что поле ультрарелятивистского заряда ($\gamma \gg 1$) приближается по своей пространственной структуре к полю плоской электромагнитной волны. В результате максимальный прицельный параметр $\tilde{\rho}_{\text{max}}$, соответствующий излучению фотона заданной частоты, растет с ростом фактора Лоренца γ , что и обуславливает рост сечения поляризационного тормозного излучения. Поскольку в рассматриваемой ситу-

ации $v \approx c$, то предлогарифмический фактор в сечении (11.75) перестает зависеть от энергии налетающей частицы. Напомним, что сечение поляризационного тормозного излучения *нерелятивистского* заряда обратно пропорционально его кинетической энергии [см. (11.31)].

Как уже отмечалось, в высокочастотном диапазоне $\omega > v/r_a$ полученные выражения (11.73), (11.75) «не работают», поскольку тогда необходим более детальный учет недипольности электромагнитного взаимодействия. Эта недипольность описывается атомным форм-фактором (11.69). Выражение для нормированного форм-фактора атома в модели экспоненциальной экранировки, когда электронная плотность убывает экспоненциально при удалении от ядра, имеет вид:

$$\tilde{F}_a(\mathbf{q}_1) = \frac{1}{1 + \mathbf{q}_1^2 r_a^2}. \quad (11.76)$$

Отсюда следует, что большие значения модуля переданного волнового вектора

$$|\mathbf{q}_1| = |\mathbf{q} + \mathbf{k}| > r_a^{-1}$$

приводят к малым сечениям процесса. Физически это уменьшение обусловлено потерей когерентности при переизлучении собственного поля налетающей частицы в реальный фотон на электронном остоле атома. Когерентность нарушается, поскольку при выполнении неравенства $|\mathbf{q}_1| > r_a^{-1}$ различные области пространственной локализации атомного электронного заряда колеблются не в фазе. Данная ситуация характерна для частотного диапазона $\omega > v/r_a$, поскольку в нем

$$|\mathbf{q}|_{\min} = \frac{\omega}{v} > r_a^{-1}.$$

Если же $\mathbf{q} \approx -\mathbf{k}$, то изменение импульса электрона компенсируется импульсом фотона, и нарушения когерентности излучения не происходит. Такая компенсация возможна при малых углах излучения релятивистских частиц. В результате поляризационное тормозное приобретает направленность вдоль скорости движения частицы.

Когерентные эффекты наиболее ярко проявляются в поляризационном тормозном излучении при рассеянии заряженных час-

тиц на кластерах, состоящих из нескольких атомов. Амплитуда этого процесса равна сумме атомных амплитуд (11.67), каждая из которых входит с фазовым множителем $\exp(i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_n)$, где \mathbf{r}_n — радиус-вектор n -го атома в кластере. В результате имеем следующее выражение:

$$A_{\text{clust}}^{(\text{PB})} = \frac{1}{2\hbar} (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_0^{(p)}) \beta_i(\omega) \tilde{F}_i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \sqrt{S(\mathbf{k} + \mathbf{q}, N)}. \quad (11.77)$$

Здесь $S(\mathbf{q}_1, N)$ — структурный фактор кластера, состоящего из N атомов. По определению он равен:

$$S(\mathbf{q}_1, N) = \left| \sum_{n=1}^N \exp(i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_n) \right|^2. \quad (11.78)$$

Структурный фактор учитывает недипольность взаимодействия электромагнитного поля с кластером.

В дальнейшем предполагаем, что кластер является сферически-симметричным образованием. Тогда для его структурного фактора можно использовать следующее модельное представление:

$$S(\mathbf{q}_1, N) = N^2 F_J^2(q_1, N) + N [1 - F_J^2(q_1, N)], \quad (11.79)$$

где $F_J(q_1, N)$ — нормированный на один атом форм-фактор сферического кластера в модели желе,

$$F_J(q_1, N) = 3 \frac{j_1[q_1 r(N)]}{q_1 r(N)}; \quad (11.80)$$

$r(N)$ — зависящий от числа атомов N радиус кластера, который может быть вычислен по формуле:

$$r(N) = r_{\text{ws}} \sqrt[3]{N} = \sqrt[3]{\frac{3N}{4\pi n_a}}, \quad (11.81)$$

где r_{ws} — радиус Вигнера—Зейтца; n_a — твердотельная концентрация атомов кластера; $j_1(x)$ — сферическая функция Бесселя первого порядка:

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}. \quad (11.82)$$

Модель желе предполагает, что вероятность распределения атомов в кластере одинакова всюду внутри сферы радиуса $R = r(N)$:

$$w_j(r, N) = \frac{3N\theta[r(N) - r]}{4\pi[r(N)]^3}, \quad (11.83)$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хэвисайда (не путать с углом излучения).

В случае одноатомного кластера структурный фактор (11.80) равен единице.

Первое слагаемое в правой части (11.79) представляет собой когерентную часть структурного фактора кластера (оно пропорционально квадрату числа атомов), второе слагаемое — некогерентную, пропорциональную числу атомов в первой степени. Для малых величин переданного волнового вектора $q_1 < r_a^{-1}$ имеем: $F_j(q_1, N) \approx 1$, и доминирует когерентная составляющая структурного фактора. В случае больших величин $q_1 > r_a^{-1}$: $F_j(q_1, N) \approx 0$, и основной вклад дает некогерентное слагаемое.

Сравнение амплитуд поляризационного тормозного излучения на отдельном атоме (11.67) и на кластере (11.77) показывает, что сечения этих процессов отличаются только квадратом структурного фактора (11.78). С учетом этого из формулы (11.71) получаем для дифференциального по частоте и углу излучения фотона сечения на кластере следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\text{clust}}^{\text{PB}}}{d\omega d\Omega_k} = & \quad (11.84) \\ = \frac{\omega^3 e_p^2 |\beta_i(\omega)|^2}{\pi^2 \hbar v c^3} \int \delta(\omega + \mathbf{q}v) \frac{[\mathbf{n}, \mathbf{q} + (\omega/c^2)\mathbf{v}]^2}{[\mathbf{q}^2 - (\omega/c)^2]^2} |\tilde{F}_{ii}(q_1)|^2 S(q_1, N) dq. \end{aligned}$$

Анализ данной формулы показывает, что зависимость сечения (11.84) от числа атомов в кластере носит, вообще говоря, нелинейный характер. Назовем это отклонение от линейности кооперативным эффектом в поляризационном тормозном излучении на кластере. Физическая причина кооперативного эффекта состоит в когерентности переизлучения собственного поля налетающей частицы в реальный фотон различными атомами кластера. Чтобы установить

границы существенности этой когерентности выпишем выражение для минимального переданного мишени волнового вектора:

$$q_{1\min}(\omega, v, \theta) = \frac{\omega}{v} \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right). \quad (11.85)$$

Условие существенности кооперативного эффекта имеет вид:

$$q_{1\min} < \frac{1}{r(N)}, \quad (11.86)$$

где $r(N)$ — радиус кластера (11.81). В противном случае мал форм-фактор кластера (11.80), и вклад различных атомов в сечение процесса некогерентен. С ростом числа атомов радиус кластера увеличивается, так что при $N > N_{\text{sat}}$, где N_{sat} — «насыщающее» число атомов, неравенство (11.86) нарушается,

$$N_{\text{sat}} = \frac{4\pi n_a v^3}{3\omega^3 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right)^3}. \quad (11.87)$$

Итак, существует предельное число атомов в кластере N_{sat} , при превышении которого кооперативный эффект отсутствует. Как следует из (11.87), это число уменьшается с ростом частоты и для релятивистских частиц сильно зависит от угла излучения θ .

Кооперативный эффект в тормозном излучении на кластере удобно характеризовать отношением:

$$\xi = \frac{d\sigma(N)}{Nd\sigma(N=1)}. \quad (11.88)$$

В отсутствие кооперативного эффекта, очевидно, $\xi = 1$. В противоположном предельном случае конструктивной интерференции вкладов атомов кластера в интенсивность ТИ имеем: $\xi = \chi N$, $\chi < 1$. Коэффициент ξ учитывает, что не все переданные импульсы, существенные в процессе на отдельном атоме, дают заметный вклад в когерентную часть ТИ на кластере.

Зависимость параметра ξ от числа атомов в кластере меди для поляризационного и статического каналов тормозного излучения представлена на рис. 11.6. Энергия тормозного фотона равна 1 кэВ, фактор Лоренца $\gamma = 10$, что соответствует энергии на-

летающего электрона 5 МэВ. Из рисунка видно, что кооперативный эффект пренебрежимо мал для статического канала ($\xi = 1$) и весьма существен для поляризационного канала. В последнем случае в интервале $N < N_{\text{sat}}$ сечение процесса возрастает квадратично [см. (11.88)]. Для параметров рис. 11.6 формула (11.87) дает следующие насыщающие числа атомов: $N_{\text{sat}}(\theta = 1 \text{ рад}) = 27$ и $N_{\text{sat}}(\theta = 0,5 \text{ рад}) = 1312$.

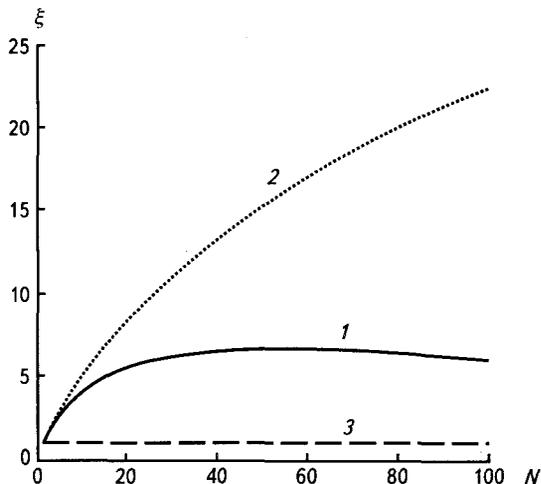


Рис. 11.6. Кооперативный эффект в тормозном излучении электрона, рассеивающегося на кластере меди ($\gamma = 10$, $\hbar\omega = 1$ кэВ):

1 — поляризационный канал, $\theta = 1$ рад; 2 — поляризационный канал, $\theta = 0,5$ рад; 3 — статический канал

Результаты расчета по формуле (11.84) углового распределения излучения электрона на кластерах меди с различным числом атомов приведены на рис. 11.7 вместе с данными для отдельного атома.

Видно, что угловое распределение поляризационного тормозного излучения с ростом числа атомов кластера сужается, причем зависимость сечения процесса от угла в пределе больших значений числа N становится немонотонной. Данная немонотонность исчезает в нерелятивистском случае, а также с уменьшением частоты излучения и возрастает с ростом числа атомов.

Условие существенности кооперативного эффекта в спектре поляризационного тормозного излучения на кластере может быть по-

лучено из неравенства (11.86) с учетом равенства (11.85). Это условие имеет вид:

$$\omega < \omega_{\max} = \sqrt[3]{\frac{4\pi n_a}{3N}} \frac{v}{1 - (v/c)\cos\theta}. \quad (11.89)$$

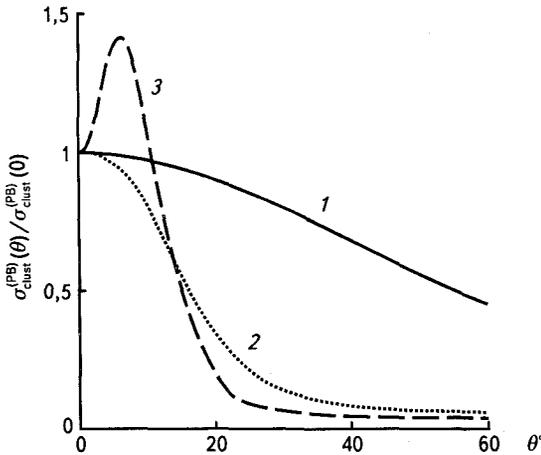


Рис. 11.7. Угловая зависимость нормированного сечения поляризационного тормозного излучения электрона на отдельном атоме (1) и кластерах меди: $N = 100$ (2), $N = 1000$ (3); $\hbar\omega = 5$ кэВ, $\gamma = 10$

Зависимость спектра поляризационного тормозного излучения на кластере меди, состоящем из 10 атомов, от энергии рассеивающегося электрона представлена на рис. 11.8 для угла излучения 0,5 рад. (Атомная единица сечения равна $2,8 \cdot 10^{-17}$ см².) Видно, что с ростом Лоренц-фактора интенсивность излучения растет, а максимум спектральной зависимости смещается в область высоких частот. Эти изменения особенно заметны при переходе от быстрых, но нерелятивистских налетающих частиц к слаборелятивистским частицам.

Анализ показывает, что с уменьшением угла излучения спектр рассматриваемого процесса оказывается сильнее затянутым в область высоких частот в соответствии с формулой (11.89). Это обстоятельство связано с уменьшением минимального переданного мишени волнового вектора (11.85) при $\theta \rightarrow 0$, и соответственно с лучшим выполнением критерия существенности кооперативного

эффекта (11.86). Равенство (11.89) также предсказывает уменьшение максимальной частоты когерентного излучения с ростом числа атомов в кластере, хотя эта зависимость весьма слабая:

$$\omega_{\max} \propto \frac{1}{\sqrt[3]{N}}.$$

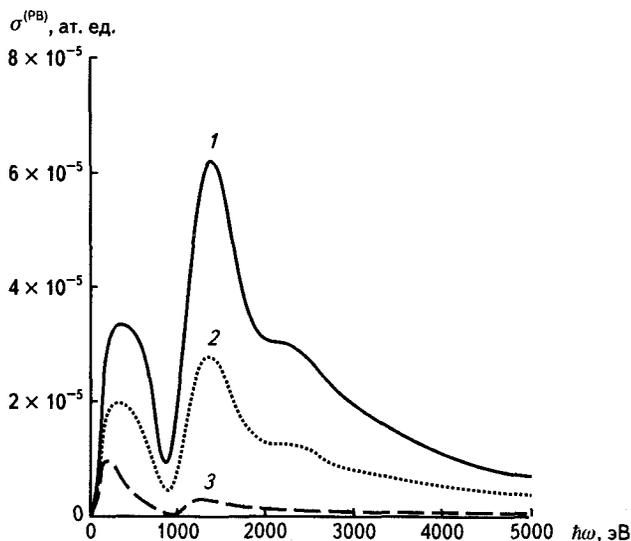


Рис. 11.8. Спектр поляризационного тормозного излучения на кластере меди ($N = 10$) для различных значений Лоренц-фактора и угла излучения 0,5 радиан:
 1 — $\gamma = 10^2$; 2 — $\gamma = 10$; 3 — $\gamma = 1,1$

Таким образом, проведенное рассмотрение показало, что поляризационное тормозное излучение релятивистских заряженных частиц на кластерах обнаруживает кооперативный эффект: квадратичную зависимость сечения процесса от числа атомов в кластере. Физическая причина данного эффекта состоит в конструктивной интерференции вкладов различных атомов, которая возникает в определенной области изменения параметров задачи. Возможность конструктивной интерференции обусловлена тем, что поляризационное тормозное излучение (в отличие от статического канала) происходит на больших расстояниях от мишени, так что несколько атомов кластера одновременно участвуют в элементарном излучательном акте.

11.5. ПОЛЯРИЗАЦИОННОЕ ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ

Металлические наночастицы из благородных металлов находят применение в качестве наномаркеров биологических объектов, для исследования протекания химических и биологических процессов, как сенсоры для локального оптического мониторинга окружающей среды, для электрического управления переключением света, измерения электрического заряда и т. д. [2]. В указанных применениях, как правило, используется рассеяние электромагнитного излучения в спектральном диапазоне, отвечающем возбуждению поверхностных плазмонов (энергия фотона $\hbar\omega = 1-4$ эВ). Положение плазмонного резонанса в сечении рассеяния фотона на металлической сфере чувствительно к состоянию окружающей среды, в которую помещена наночастица. На этом основаны сенсорные применения наночастиц, а также возможность их использования в современных оптических коммуникационных и дисплейных системах.

В последние годы появились работы посвященные исследованию поляризационного тормозного излучения (ПТИ) как базового процесса для диагностики наноматериалов. Так, например, в статье [3] обсуждалась возможность использования этого процесса для определения структуры фуллерена на основе вычисления форм-фактора мишени. В работе [4] было продолжено исследование когерентной радиационной диагностики параметров наноструктур с помощью рассеяния на них быстрых электронов. Рассмотрение статьи [3] было обобщено на случай релятивистских электронов с Лоренц-фактором порядка 10. Расчет проводился для тонкостенного фуллерена и фуллерена с атомами того же сорта внутри. Спектроскопия ПТИ для диагностики поликристаллических и мелкозернистых сред с более общих позиций модификации энергодисперсионного метода рассматривалась в работе [5]. При этом отмечались следующие преимущества данного подхода по сравнению с традиционным методом рентгеновской спектроскопии: возможность исследования малых участков в образце с помощью сфокусированных электронных пучков; высокая чувствительность метода к межатомным корреляциям и соответственно к структуре вещества; возможность использования рентгеновского детектора в фиксированном положении и ряд других преимуществ.



В настоящем разделе проводится анализ ПТИ на металлических наносферах, помещенных в диэлектрическую матрицу, необходимый для разработки физической основы использования ПТИ для диагностики наноматериалов.

В борновском приближении по взаимодействию НЧ с мишенью, находящейся в диэлектрической среде, дифференциальное сечение ПТИ дается выражением [6]

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega d\Omega_k} = \frac{2}{\pi} \frac{\omega^3}{c^3} \frac{e_p^2}{\hbar v^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} |\beta(\omega, q)|^2 I_\phi(q, v, \omega, \theta) \frac{dq}{q}, \quad (11.90)$$

где $d\Omega_k$ — элемент телесного угла в направлении излучения; c — скорость света; e_p — заряд налетающей частицы (НЧ); v — скорость НЧ; $\beta(\omega, q)$ — обобщенная динамическая поляризуемость мишени; \mathbf{k} — волновой вектор тормозного фотона в среде с диэлектрической проницаемостью ϵ_m ,

$$\mathbf{k} = \sqrt{\epsilon_m} \frac{\omega}{c} \mathbf{s};$$

θ — угол между вектором скорости электрона и волновым вектором тормозного фотона (угол излучения). Величина

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i + \mathbf{k}}{\hbar}$$

представляет собой переданный от НЧ мишени волновой вектор ($\mathbf{p}_{i,f}$ — начальный и конечный импульсы НЧ). Пределы интегрирования в правой части равенства (11.90) равны:

$$q_{\min} = \left(1 - \frac{v}{\tilde{c}} \cos \theta\right) \frac{\omega}{v}; \quad q_{\max} = \frac{2\mu v}{\hbar},$$

где \tilde{c} — скорость света в среде,

$$\tilde{c} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_m}}.$$

Безразмерный кинематический интеграл $I_\phi(q, v, \omega, \theta)$, фигурирующий в формуле (11.90), определяется равенством

$$I_\phi(q, v, \omega, \theta) = \frac{q^3 v}{2\pi} \int d\Omega_q \delta(\omega - \mathbf{k}v + \mathbf{q}v) \frac{[s, \omega \epsilon_m v/c^2 - \mathbf{q}]^2}{(q^2 - 2kq)^2}, \quad (11.91)$$

где s — единичный вектор в направлении излучения фотона. Интеграл по телесному углу переданного мишени волнового вектора в определении (11.91) может быть вычислен в элементарных функциях [7]. Соответствующее выражение мы здесь не приводим из-за его громоздкости.

В мультипликативном приближении, которое хорошо работает для многоэлектронных систем [8], имеет место равенство

$$\beta(\omega, q) = \beta(\omega) \tilde{F}(q), \quad (11.92)$$

где $\beta(\omega)$ — динамическая поляризуемость; $\tilde{F}(q)$ — нормированный форм-фактор мишени [$\tilde{F}(0) = 1$]. Подставляя соотношение (11.92) в формулу (11.90) и используя выражение для сечения рассеяния излучения через поляризуемость мишени

$$\sigma_{\text{scat}}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\omega}{c}\right)^4 |\beta(\omega)|^2, \quad (11.93)$$

находим представление сечения ПТИ на изолированной мишени через сечение рассеяния излучения

$$\frac{d\sigma^{\text{PB}}}{d\omega d\Omega_k} = \frac{3}{4\pi^2} \frac{c}{v^2} \frac{e_p^2}{\hbar\omega} \sigma_{\text{scat}}(\omega) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \tilde{F}^2(q) I_\phi(q, v, \omega, \theta) \frac{dq}{q}. \quad (11.94)$$

Характерной особенностью металлических наносфер является существенная зависимость сечения рассеяния излучения от их радиуса r_s и материала среды, в которой находится наносфера. На последнем факте основывается возможность использования металлических наночастиц в качестве оптических сенсоров [2].

Удобство использования выражения (11.94) применительно к анализу ПТИ на металлических наносферах в диапазоне энергий фотонов 1–5 эВ заключается в том, что сечение рассеяния $\sigma_{\text{scat}}(\omega)$ может быть рассчитано с помощью теории Ми [9]. В рамках этой теории сечение рассеяния излучения на металлической сфере радиуса r_s , помещенной в диэлектрическую среду, имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{scat}}^{(\text{Mie})}(\omega) &= \\ &= \frac{2\pi c^2}{\epsilon_m \omega^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left\{ |a_n(x, mx, m)|^2 + |b_n(x, mx, m)|^2 \right\}, \end{aligned} \quad (11.95)$$

где x и m — параметры теории Ми,

$$x = kr_s = \sqrt{\varepsilon_m} \frac{\omega}{c} r_s; \quad m = \sqrt{\frac{\varepsilon_s(\omega)}{\varepsilon_m}};$$

$\varepsilon_s(m)$ — диэлектрическая проницаемость материала наносферы. Коэффициенты разложения a_n и b_n даются формулами (5.58)—(5.61).

Формула для нормированного форм-фактора сферической мишени имеет вид

$$\tilde{F}_s(q) = 3 \frac{j_1(qr_s)}{qr_s}. \quad (11.96)$$

Из приведенного равенства, в частности, следует, что

$$\tilde{F}_s(q=0) = 1; \quad \tilde{F}_s\left(q > \frac{4}{r_s}\right) < 0,01.$$

Используем формулы (11.94)—(11.96) для расчета сечения ПТИ при рассеянии электрона на серебряных наносферах, помещенных в стеклянную матрицу ($\varepsilon_m = 2,25$) в диапазоне энергий тормозных фотонов от 0 до 4 эВ. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости материала мишени $\varepsilon_s(\omega)$ определялась с помощью экспериментальных данных по комплексному показателю преломления серебра [10]. В диссертации [2] было показано, что использование объемных значений для диэлектрической проницаемости металлических наносфер с размером от 10 нм и выше при расчете сечения рассеяния излучения хорошо воспроизводит экспериментальные результаты.

Спектральные зависимости сечения ПТИ представлены на рис. 11.9 для различных радиусов наносферы и на рис. 11.10 для различных скоростей налетающего электрона, угол излучения на этих рисунках положен равным 30° .

Максимум спектральной зависимости сечения ПТИ, представленной на рис. 11.9, обусловлен возбуждением плазмона на поверхности металлической сферы под действием электрического поля рассеивающегося электрона. Из данного рисунка видно, что с ростом радиуса наносферы положение спектрального максимума сечения ПТИ смещается в область меньших энергий фотона, а его ши-

рина возрастает. Аналогичная зависимость имеет место для сечения рассеяния излучения на металлических наносферах (см. разд. 8.5), что обусловлено изменением резонансной частоты поверхностного плазмона ω_{res} при изменении радиуса сферы. Действительно, выражение для резонансной частоты дипольного плазмона на поверхности сферы имеет вид:

$$\omega_{\text{res}} \approx \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty + 2\epsilon_m} - \gamma^2}, \quad (11.97)$$

где ω_p — плазменная частота электронов вещества сферы; γ — константа затухания поверхностного плазмона; $(\epsilon_\infty - 1)$ — вклад в диэлектрическую проницаемость металла связанных электронов. Для достаточно больших радиусов ($r_s > 30$ нм в случае серебряной сферы) константа затухания становится пропорциональной радиусу сферы в третьей степени $\gamma \propto r_s^3$, чем и определяется смещение максимума сечения рассеяния излучения и ПТИ с увеличением радиуса металлической сферы.

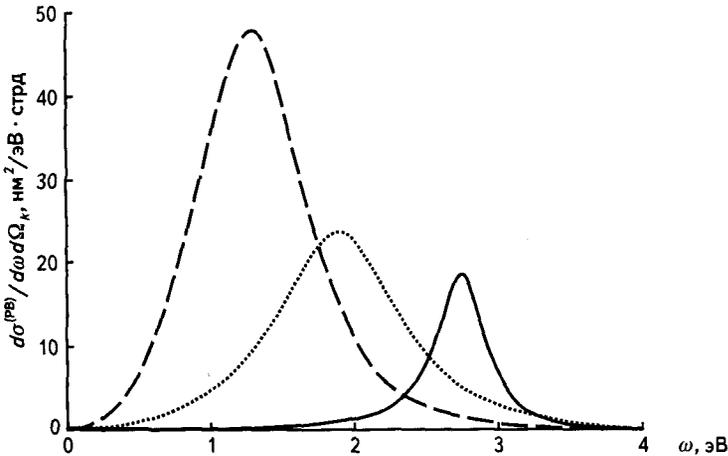


Рис. 11.9. Дифференциальное сечение ПТИ на серебряной сфере в стекле различного радиуса:

сплошная кривая — $r_s = 30$ нм; пунктирная — $r_s = 60$ нм; штриховая — $r_s = 90$ нм; $\theta = \pi/6$, $v = 50$ ат. ед.

Отметим, что наш подход, основанный на теории Ми, позволяет последовательным образом учесть сдвиг и уширение плазмонного максимума в спектре ПТИ в отличие от рассмотрения работы [11], в которой использовалось резонансное приближение для поляризуемости кластера с заданными параметрами (резонансной частотой и константой релаксации).

Для наносфер, помещенных в среду с меньшей диэлектрической проницаемостью, спектр ПТИ оказывается смещенным в область больших энергий фотонов, при этом величина сечения в максимуме уменьшается. Так, например, для серебряных наносфер в воде указанное смещение спектра составляет примерно 0,5 эВ, а уменьшение происходит в 2 раза, причем для сфер большего радиуса уменьшение сечения ПТИ более заметно.

Сравнение спектральных сечений ПТИ и рассеяния излучения на металлических наносферах (см. разд. 8.5) показывает, что для малых радиусов наносферы ($r_s < 30$ нм) положение максимума, ширина и спектральная форма сечений обоих процессов практически совпадают. Спектр ПТИ на наносферах большего радиуса более узкий, симметричный и несколько смещен в область меньших энергий фотона по сравнению со спектром рассеяния излучения.

Скорость электрона для кривых, изображенных на рис. 11.9, равна $v = 50$ ат. ед. (1 ат. ед. скорости равна $2,18 \cdot 10^8$ см/с). В случае больших скоростей электрона спектральное сечение затянато в область больших энергий фотона. Это отвечает возможности обмена меньшим волновым вектором между электроном и наносферой для излучения фотона заданной энергии.

На рис. 11.10 представлено сечение ПТИ как функция энергии фотона для различных скоростей электрона и радиуса серебряной сферы 60 нм, угол излучения равен 30° .

Видно, что для заданных значений параметров сечение ПТИ с ростом скорости электрона увеличивается, а его спектральный максимум смещается в область больших частот. Для малых радиусов наносферы $r_s < 20$ нм на спектральной кривой сечения ПТИ появляются дополнительные максимумы, обусловленные возбуждением квадрупольных и октоупольных поверхностных плазмонов. Относительная величина дополнительных максимумов в спектре ПТИ возрастает при приближении угла излучения к 90° .

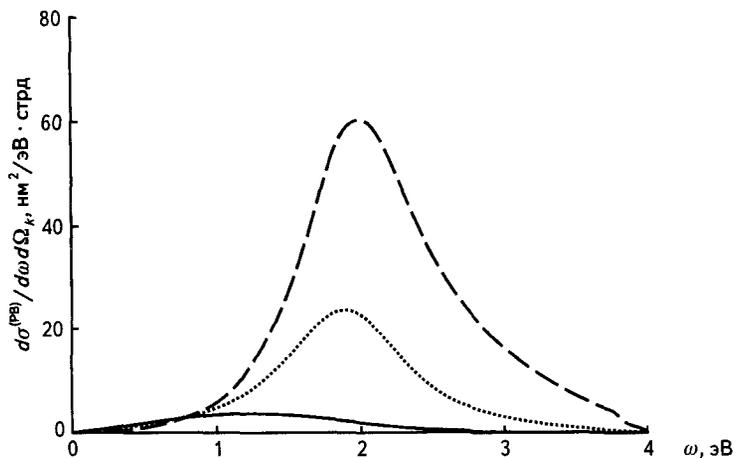


Рис. 11.10. Дифференциальное сечение ПТИ на серебряной сфере в стекле для различных скоростей электрона:

сплошная кривая — $v = 20$ ат. ед.; пунктирная — $v = 50$ ат. ед.; штриховая — $v = 90$ ат. ед., $\theta = \pi/6$, $r_s = 60$ нм

Видно, что с приближением скорости электрона к скорости света в стеклянной матрице

$$v^* = \tilde{c} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_m}} = 91,33 \text{ ат. ед.}$$

скоростная зависимость сечения ПТИ имеет сингулярность. Физически указанная сингулярность отвечает возможности излучения электроном распространяющегося электромагнитного поля в среде без рассеяния на наносфере. Кроме того, из рис. 11.11 следует наличие максимумов на скоростной зависимости сечения ПТИ для достаточно малых радиусов металлических сфер. Отвечающее этим максимумам значение скорости электрона v_{\max} уменьшается с уменьшением радиуса в соответствии с соотношением $v_{\max} \propto \omega r_s$. Осцилляции сечения ПТИ на рис. 11.11 при малых скоростях электрона возникают из-за вклада в процесс больших переданных волновых векторов: $q > 4/r_s$, когда имеют место осцилляции форм-фактора мишени (11.96) как функции аргумента $x = qr_s$.

Зависимость дифференциального сечения ПТИ от радиуса наносферы для различных энергий тормозного фотона демонстриру-

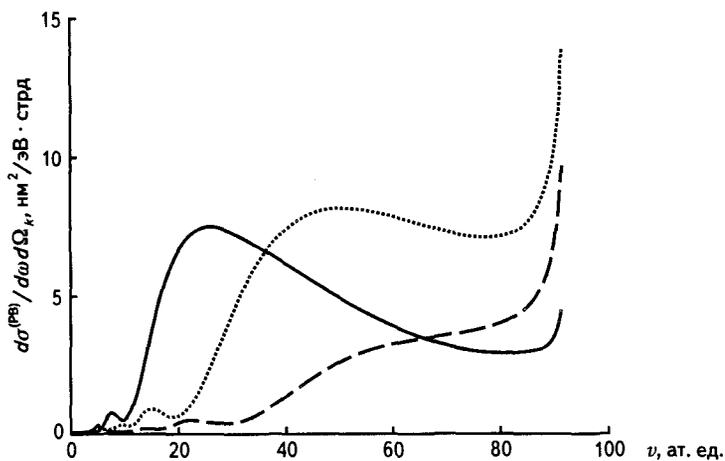


Рис. 11.11. Зависимость дифференциального сечения ПТИ электрона на серебряной сфере в стекле от скорости, $\theta = \pi/2$, $\hbar\omega = 2,8$ эВ:
 сплошная кривая — $r_s = 20$ нм; пунктирная — $r_s = 40$ нм; штриховая — $r_s = 60$ нм

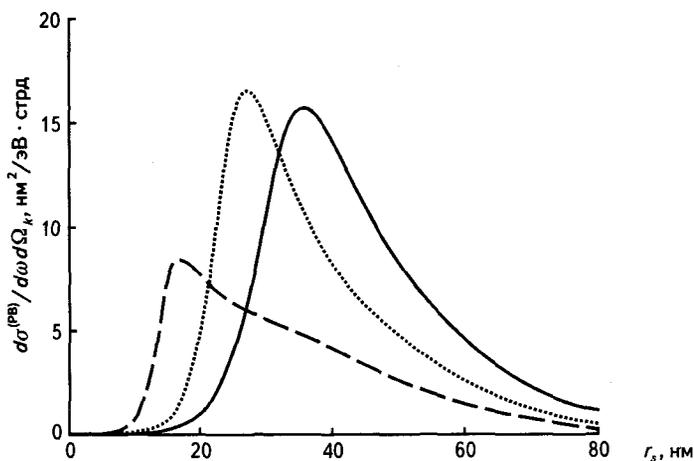


Рис. 11.12. Зависимость дифференциального сечения ПТИ электрона на серебряной сфере в стекле от радиуса наночастицы, $v = 50$ ат. ед., $\theta = \pi/2$:
 сплошная кривая — $\hbar\omega = 2,6$ эВ; пунктирная — $\hbar\omega = 2,8$ эВ; штриховая — $\hbar\omega = 3,0$ эВ

ется на рис. 11.12 для скорости электрона 50 ат. ед. и угла излучения 90° .

Из рис. 11.12 следует, что при увеличении энергии фотона оптимальный радиус наночастицы, при котором сечение ПТИ максимально, уменьшается. При этом оказывается, что наибольшая величина сечения в максимуме зависимости от радиуса достигается для $\hbar\omega = 2,8$ эВ.

Рис. 11.13 демонстрирует сужение угловой зависимости нормированного сечения ПТИ с ростом радиуса наносферы для скорости НЧ, близкой к скорости света в среде: $v \rightarrow \bar{c}$. Нормировка сечения проведена на его значение при нулевом угле излучения. Из данного рисунка видно, что для малых радиусов наносферы ($r_s = 10$ нм) угловая зависимость сечения ПТИ практически совпадает с угловой зависимостью излучения линейного диполя. Для меньших скоростей электрона эффект сужения углового распределения ПТИ тоже имеет место, хотя и не столь явно выражен.

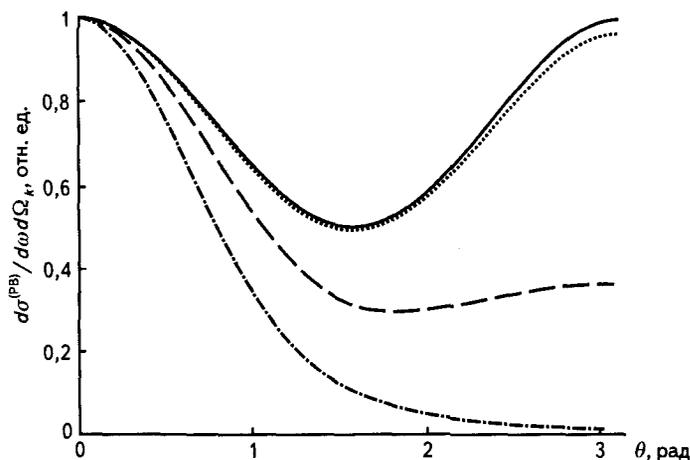


Рис. 11.13. Угловая зависимость нормированного сечения ПТИ электрона на серебряной наносфере в стекле для различных радиусов наночастицы, $v = 91$ ат. ед., $\hbar\omega = 2,8$ эВ:

сплошная кривая — дипольная зависимость $(1 + \cos^2 \theta)/2$; пунктирная — $r_s = 10$ нм; штриховая — $r_s = 50$ нм; штрихпунктирная — $r_s = 90$ нм

Эффект сужения угловой зависимости ПТИ на атомарных кластерах в высокочастотном диапазоне демонстрируется рис. 11.7.

Литература

1. Поляризационное тормозное излучение атомов и частиц / Под ред. В.Н. Цытовича и И.М. Ойрингеля. М.: Наука, 1987. 336 с.
2. *Sonnichsen C.* Plasmons in metal nanostructures. Gottingen: Cuvillier Verlag, 2001. 134 p.
3. *Гришин В.К.* Поляризационное тормозное излучение как средство диагностики структуры фуллеренов. Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2004, № 2, с. 69—71.
4. *Гришин В.К., Ишханов Б.С., Шведунов В.И., Насонов Н.Н.* Когерентная радиационная диагностика параметров наноструктур на электронных ускорителях. Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2007, № 6, с. 29—33.
5. *Астапенко В.А., Гостищев Н.А., Жукова П.Н., Насонов Н.Н.* Модификация EDXD метода диагностики поликристаллических и мелкозернистых сред. Известия РАН. Сер. Физическая. 2008. № 6, с. 11—17.
6. *Астапенко В.А.* Тормозное излучение быстрых заряженных частиц на кластерах в широком спектральном диапазоне. ЖЭТФ, 2005. Т. 128, с. 88—94.
7. *Астапенко В.А.* Поляризационное тормозное излучение тяжелых заряженных частиц в поликристалле. ЖЭТФ, 2004. Т. 126, с. 1101—1108.
8. *Король А.В., Лялин А.Г., Оболенский О.И., Соловьев А.В.* Исследование роли поляризационного механизма излучения атомов в широком диапазоне частот фотонов. ЖЭТФ, 1998. Т. 114, с. 458—473.
9. *Van de Hulst H.C.* Light scattering by small particles. NY: Dover Publications, 1981. 470 p.
10. *Johnson P.B., Chirsty R.W.* Optical constants of the noble metals. Phys. Rev. B. 1972. V. 6, pp. 4370—4379.
11. *Lyalin A.G., Solov'yov A.V.* Polarizational bremsstrahlung from atomic clusters. Rad. Phys. Chem. 2006. V. 75, pp. 1358—1379.

12.1. ФОРМУЛА ТОМСОНА

Ионизация атомов электронным ударом является важнейшим элементарным процессом, определяющим характеристики как лабораторной, так и астрофизической низкотемпературной плазмы. Последовательное описание этого явления требует использования квантово-механического подхода. Однако его основные качественные черты можно установить и в рамках классической механики. Впервые соответствующая формула для сечения была предложена Дж. Томсоном в 1912 г. еще до создания квантовой теории.

Классическое рассмотрение ионизации атома электронным ударом



проведенное Томсоном, основано на предположении об упругом рассеянии налетающей частицы на связанных электронах мишени. Ионизация в данном подходе возникает как следствие передачи атому энергии, большей, чем потенциал ионизации рассматриваемой электронной подоболочки, в результате рассеяния на ней налетающей частицы. Применимость классического метода оценки сечения ионизации атома базируется на точном совпадении квантово-механического и классического выражения для сечения упругого электрон-электронного рассеяния.

Без учета связи атомных электронов с ядром выражение для интегрального (по углу рассеяния) сечения столкновительной ионизации можно представить в виде [1]

$$\sigma_i = \int_{\Delta E > I} d\sigma, \quad (12.2)$$

где $d\sigma$ — дифференциальное сечение электрон-электронного рассеяния; ΔE — переданная от налетающей частицы энергия; I — потенциал ионизации атома. Пренебрегая изменением энергии налетающего электрона по сравнению с его начальной энергией, для вывода сечения $d\sigma$ можно воспользоваться формулой Резерфорда, которая описывает сечение упругого рассеяния заряженной частицы в кулоновском потенциале:

$$\frac{d\sigma^{(R)}}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2, \quad (12.3)$$

где $d\Omega$ — элемент телесного угла, в который рассеивается налетающая частица; θ — угол рассеяния; v — скорость налетающего электрона. Для электрон-электронного рассеяния $Z = 1$. Полагая, что величина переданной атомному электрону энергии ΔE равна энергии отдачи, легко найти, что

$$\Delta E = 4E \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (12.4)$$

При выводе (12.4) использовалось соотношение для переданного импульса в пренебрежении связью атомного электрона с ядром:

$$\Delta p = 2mv \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (12.5)$$

которое следует из элементарного рассмотрения упругого рассеяния. Используя равенство (12.4), можно выразить угол рассеяния через переданную атомному электрону энергию ΔE . В результате из (12.3) для одноэлектронного атома имеем

$$d\sigma = \frac{\pi e^4 d\Delta E}{E (\Delta E)^2}, \quad (12.6)$$

где $E = mv^2/2$ — энергия налетающего электрона. Подставляя выражение (12.6) в (12.2) и интегрируя по возможным значениям переданной энергии ΔE , получаем формулу Томсона для сечения ударной ионизации одноэлектронного атома:

$$\sigma_i = \int_I^E d\sigma = \frac{\pi e^4}{E} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{E} \right), \quad E > I. \quad (12.7)$$

Если ввести безразмерный параметр $x = E/I$, правая часть равенства (12.7) переписывается в виде

$$\sigma_i^{(\text{Th})}(E) = \frac{\pi e^4}{I^2} \frac{x-1}{x^2}, \quad x \geq 1. \quad (12.8)$$

Ясно, что значение $x_{\text{th}} = 1$ ($E_{\text{th}} = I$) является пороговым: при $x < 1$ сечение процесса равно нулю, так как энергии налетающего электрона недостаточно для ионизации атома.

12.2. МЕТОД ФУНКЦИИ ПОДОБИЯ ДЛЯ СЕЧЕНИЯ ИОНИЗАЦИИ

Формула Томсона (12.8) качественно верно передает особенности процесса ударной ионизации одноэлектронного атома. Однако с количественной точки зрения она является весьма грубой. Для того чтобы получить более реалистичское описание, выражение (12.8) целесообразно представить следующим образом [1]:

$$\sigma_i^{(\text{Th})}(E) = \pi a_I^2 f^{(\text{Th})}\left(\frac{E}{I}\right). \quad (12.9)$$

Здесь введена безразмерная *функция подобия* Томсона

$$f^{(\text{Th})}(x) = \frac{x-1}{x^2},$$

описывающая зависимость сечения ударной ионизации от энергии налетающей частицы, и радиус ионизации:

$$a_I = \frac{e^2}{I}. \quad (12.10)$$

Как легко видеть из формулы (12.10), радиус ионизации равен расстоянию между налетающим и атомным электроном, на котором энергия их кулоновского взаимодействия равна потенциалу ионизации атома. Радиус a_I определяет сечение $\sigma_I = \pi a_I^2$, которое по порядку величины характеризует сечение ударной ионизации одноэлектронного атома.

Из формулы (12.9) следует, что энергия налетающей частицы входит в выражение для сечения ударной ионизации только через отношение E/I . Это обстоятельство лежит в основе метода функций подобия. Данный метод предполагает, что отношение сечения ионизации к величине $\sigma_I = \pi a_I^2$ является универсальной функцией безразмерной переменной $x = E/I$. Таким образом, формула (12.9) обобщается: в ней фигурирует функция подобия $f(x)$, явный вид которой может быть определен либо в рамках выбранного теоретического подхода, либо эмпирическим путем.

Функция подобия Томсона достигает своего максимума, равного $1/4$, при $x_{\max} = 2$, т. е. при $E_{\max} = 2I$. Сравнение с экспериментальными данными показывает, что это значение x_{\max} слишком мало. Иными словами, формула Томсона смещает истинное положение максимума сечения ближе к пороговому значению $E_{\text{th}} = I$. На самом деле максимум сечения ударной ионизации лежит в пределах от $E_{\max} = 3I$ до $E_{\max} = 4I$ (см. разд. 12.3).

Любопытно отметить, что формула Томсона дает значение сечения ударной ионизации атома водорода в максимуме:

$$\sigma_i^{(\text{H})}(E_{\max}) = \pi a_B^2 \approx 0,88 \text{ \AA}^2$$

(a_B — радиус Бора), равное площади первой боровской орбиты. Энергия в максимуме, согласно формуле (12.8), составляет

$$E_{\max} = 2I_{1s}^{(\text{H})} \approx 27,2 \text{ эВ},$$

что совпадает с атомной единицей энергии.

Итак, для реалистического описания сечения ионизации атома электронным ударом необходимо использовать другие функции подобия. В случае большой величины потенциала ионизации ($I > 10$ эВ) хорошее соответствие с экспериментом дает функция подобия Гринжинского:

$$f^{(\text{Grz})}(x) = \frac{1}{x} \left(\frac{x-1}{x+1} \right)^{3/2} \left[1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2x} \right) \ln(2,7 + \sqrt{x-1}) \right], \quad (12.11)$$

выведенная в рамках классического рассмотрения, и функция подобия Елецкого—Смирнова:

$$f^{(\text{ES})}(x) = \frac{10(x-1)}{\pi x(x+8)}, \quad (12.12)$$

полученная эмпирическим путем (на основании сравнения с экспериментальными данными). Заметим, что функции (12.11) и (12.12) близки друг к другу.

Формулы (12.8) и (12.9) получены для одноэлектронного атома. При расчете ударной ионизации многоэлектронных атомов выражение (12.9) необходимо обобщить так, чтобы учесть вклад различных подоболочек атома в полное сечение процесса и число электронов в каждой подоболочке. Результирующая формула имеет вид

$$\sigma_i(E) = \sum_{nl} N_{nl} \pi a_f^2 f\left(\frac{E}{I_{nl}}\right) \theta(E - I_{nl}), \quad (12.13)$$

где N_{nl} , I_{nl} — число эквивалентных электронов и потенциал ионизации nl -подоболочки (n , l — главное и орбитальное квантовые числа); $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хэвисайда, которая описывает «включение» внутренних атомных подоболочек в процесс при $E > I_{nl}$.

Сравнение с экспериментальными данными показывает, что функции подобия (12.11) и (12.12) дают наилучший результат для атомов с большим потенциалом ионизации: $I > 10$ эВ. Напомним, что $I = \min \{I_{nl}\}$. В случае многоэлектронных атомов с умеренным значением величины I ($10 \text{ эВ} > I > 6 \text{ эВ}$) для описания ударной ионизации более адекватна функция подобия Борна—Комптона [2]:

$$f^{(BC)}(x) = \frac{2,5}{\pi} \frac{1}{x} \int_1^{y_m} dy \frac{\int_{\sqrt{x}-\sqrt{x-y}}^{\sqrt{x}+\sqrt{x-y}} dt}{t^2 [t^2 + (y - t^2)^2 / 0,64]}, \quad (12.14)$$

где

$$y_m = \frac{x+1}{2}.$$

Функция подобия (12.14) получена в первом борновском приближении по взаимодействию налетающей частицы с атомными электронами. При ее выводе использовалась аналогия между ударной ионизацией и комптоновским рассеянием собственного поля налетающей частицы на атоме, электронная оболочка которого описывалась в рамках модели Томаса—Ферми.

В случае, когда значительный вклад в процесс дают атомные подоболочки с большим орбитальным квантовым числом ($l = 2, 3$), использование вышеприведенных функций подобия может оказать-

ся недостаточным. Тогда может быть использована функция подобия так называемого ВЕВ (Binary Encounter Bethe) приближения [3]:

$$f^{(ВЕВ)}(x, u) = \frac{1}{1+x+u} \left[\frac{\ln(x)}{2} \left(1 - \frac{1}{x^2} \right) + 1 - \frac{1}{x} - \frac{\ln(x)}{1+x} \right], \quad (12.15)$$

в которой в качестве дополнительного параметра введена величина u , представляющая собой отношение средней кинетической энергии подболочки к ее потенциалу ионизации. Заметим, что для атома водорода (в силу теоремы вириала) $u = 1$. Параметр u учитывает уменьшение сечения ударной ионизации атомных подболочек с большим орбитальным моментом. Это уменьшение связано с тем обстоятельством, что при равных потенциалах ионизации подболочка с большим орбитальным моментом обладает меньшим радиусом, что и приводит к уменьшению сечения процесса.

На рис. 12.1 приведены графики функций подобия (12.11), (12.12) и (12.14), (12.15).

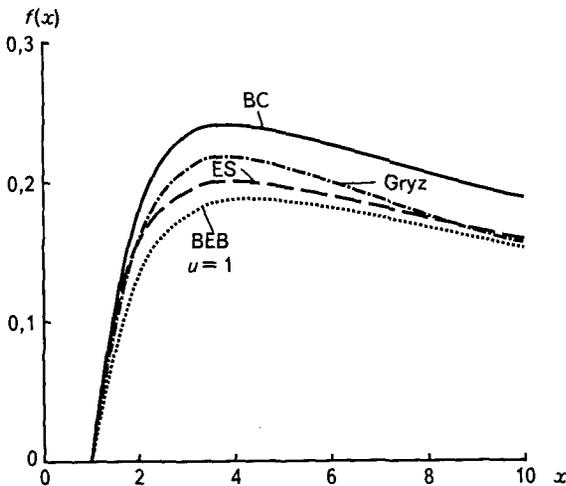


Рис. 12.1. Функции подобия сечения ударной ионизации атома:

Gryz — Грижинского; ES — Елецкого—Смирнова; BC — Борна—Комптона, ВЕВ — ВЕВ-приближения

Общей чертой всех приведенных функций подобия является их одинаковая околороговая зависимость: $f(x) \propto x - 1$. Эта зависи-

мость есть следствие общей квантово-механической закономерности, связанной с поведением статистического веса конечного состояния ионизированного электрона как функции энергии налетающей частицы. С другой стороны, асимптотическое поведение функций подобия при высоких энергиях налетающего электрона $E \gg I (x \gg 1)$ разное. Действительно, из формул (12.11), (12.12) и (12.14), (12.15) при $x \gg 1$ вытекают следующие соотношения:

$$f^{(\text{Грыз}), (\text{ВЕВ})} \propto \frac{\ln(x)}{x}; \quad f^{(\text{ЕС}), (\text{BC})} \propto \frac{1}{x}.$$

Первая асимптотика совпадает с высокоэнергетическим пределом сечения неупругого процесса в квантово-механической теории Бете, вторая отклоняется от него, но дает лучшее соответствие с экспериментом при не слишком высоких энергиях налетающей частицы.

Метод функции подобия выгодно отличается от других способов расчета сечения ударной ионизации простотой и надежностью, он часто используется для экспресс-оценок сечения рассматриваемого процесса.

12.3. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

К настоящему времени измерены сечения ионизации электронным ударом нейтральных атомов большинства элементов таблицы Менделеева. С этой целью часто используется метод скрещенных пучков быстрых нейтральных атомов и электронов. Типичная реализация данного метода состоит в следующем. Пучок быстрых нейтралов получается с помощью нейтрализации быстрых (с энергией в несколько килоэлектронвольт) ионов в камере с газом низкого давления (порядка 10^{-4} Торр). Ионный пучок предварительно экстрадируется из газового разряда постоянного тока, фокусируется и пропускается через специальный фильтр, который осуществляет сортировку ионов по скоростям. Полученный в результате пучок быстрых нейтралов с заданной энергией сохраняет коллимацию исходного ионного пучка, что необходимо для высокой точности эксперимента. Поток нейтральных атомов измеряется по абсолютной величине с помощью откалиброванного детектора. Измерение сечения ударной ионизации производится с помощью пересечения пуч-

ка нейтралов с электронным пучком. Возникающие в результате электрон-атомных столкновений ионы фокусируются на электростатический анализатор, выделяющий ионы с данным зарядовым числом, которые затем регистрируются с помощью электронного умножителя. На основании измеренных данных экспериментальное значение сечения ионизации вычисляется по формуле

$$\sigma_i^{(exp)}(E) = \frac{J_i(E) v_e v_n}{J_e(E) R F \sqrt{v_e^2 + v_n^2}}, \quad (12.16)$$

где $J_{i,e}$ — ионный и электронный токи; $v_{n,e}$ — скорости нейтралов и электронов; R — поток нейтралов; F — величина, характеризующая степень пересечения пучка нейтралов и пучка электронов. Таким образом, измерение абсолютного значения сечения ударной ионизации состоит в измерении каждой из входящих в правую часть равенства (12.16) величин.

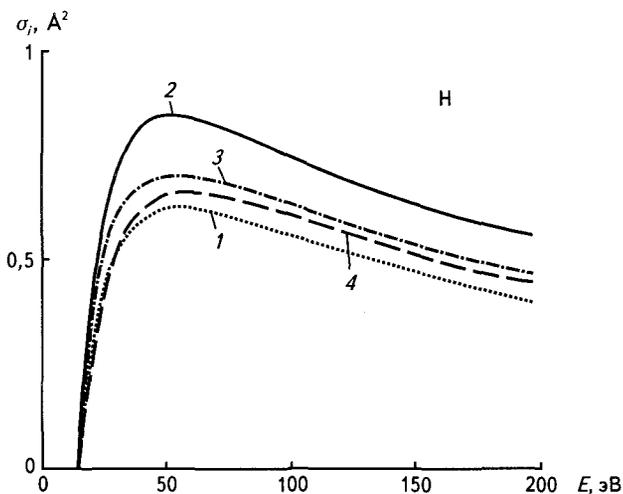


Рис. 12.2. Сечение ионизации атома водорода электронным ударом:
 1 — эксперимент; 2 — метод Борна—Комптона; 3 — формула Елецкого—Смирнова; 4 — ВЕВ-приближение при $u = 1$

На рис. 12.2 приведено сравнение экспериментального сечения ударной ионизации атома водорода с результатами вычислений методом функций подобия.

Видно, что в данном случае функции подобия Елецкого—Смирнова и ВЕВ-приближение дают лучшее соответствие с экспериментом по сравнению с методом Борна—Комптона, который заметно превышает реальное сечение процесса. Данное обстоятельство связано с тем, что формулы метода Борна—Комптона были получены в приближении Томаса—Ферми для электронной оболочки ионизируемого атома, справедливом для многоэлектронных атомов. Кроме того, потенциал ионизации атома водорода (13,6 эВ) слишком высок, так что оказывается вне рамок применимости функции подобия Борна—Комптона.

Из рис. 12.2 следует, что максимум сечения ионизации атома водорода электронным ударом достигается при энергии налетающего электрона $E_{\max} \approx 50$ эВ, в отличие от значения $E_{\max} \approx 27,2$ эВ, следующего из формулы Томсона (12.8). Величина сечения в максимуме составляет примерно $0,6 \text{ \AA}^2$, что несколько меньше предсказания теории Томсона ($0,88 \text{ \AA}^2$). Таким образом, в случае атома водорода классический подход Дж. Томсона сильно смещает положение максимума в низкоэнергетический диапазон, но дает удовлетворительную величину максимального сечения.

Интересно сравнить сечение фотоионизации атома водорода $\sigma_{\text{ph}}(\omega)$ с сечением его ионизации электронным ударом. Отличие этих сечений состоит, во-первых, в том, что сечение фотоионизации атома водорода достигает своего максимума на пороге, т. е. при энергии фотона, равной 13,6 эВ. Кроме того, величина максимального сечения фотоионизации ($0,064 \text{ \AA}^2$) почти на порядок меньше максимального сечения ударной ионизации. Можно также отметить разное асимптотическое поведение обсуждаемых сечений при высоких энергиях, когда $\sigma_{\text{ph}}(\omega) \propto \omega^{-7/2}$, в то время как

$$\sigma_i(E) \propto \frac{\ln(E)}{E},$$

т. е. сечение фотоионизации убывает значительно быстрее.

В качестве примера сравнения результатов эксперимента и теории ударной ионизации многоэлектронного атома на рис. 12.3 приведены соответствующие данные для атома теллура. Атом теллура (порядковый номер $Z = 52$) имеет следующую конфигурацию внешних электронных оболочек $(4d)^{10}(5s)^2(5p)^4$. Их потенциалы ионизации равны: $I_{4d} = 47$ эВ, $I_{5s} = 18$ эВ, $I_{5p} \approx 9$ эВ. Как следует из приведенных значений и формул (12.9), (12.10), сечение ударной ионизации

ции $5p$ -подоболочки (в максимуме) примерно на порядок превышает соответствующую величину для $5s$ -подоболочки, так что основной вклад в процесс дает внешняя атомная подоболочка. Данная ситуация является типичной: как правило, сечение ударной ионизации атома определяется его внешней подоболочкой, поскольку она обладает наименьшим потенциалом ионизации.

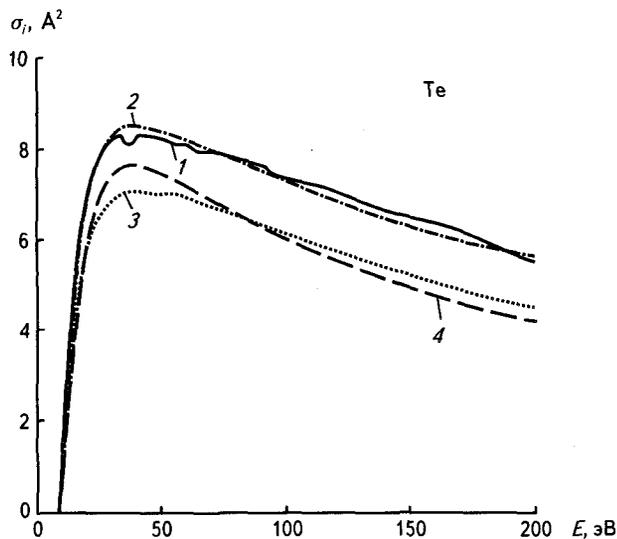


Рис. 12.3. Сечение ионизации атома теллура электронным ударом:

1 — эксперимент; 2 — метод Борна—Комптона; 3 — формула Елецкого—Смирнова; 4 — формула Грижинского

Из рис. 12.3 видно, что в данном случае наилучшее соответствие с экспериментальными данными достигается с помощью использования функции подобия Борна—Комптона (12.14). Формулы Елецкого—Смирнова и Грижинского несколько занижают реальное сечение процесса.

Величина сечения ударной ионизации нейтральных атомов, находящихся в основном состоянии, изменяется в относительно узких пределах: от $0,5 \text{ \AA}^2$ (для гелия) до примерно 10 \AA^2 для тяжелых атомов типа теллура. Атомы в возбужденных состояниях с малым потенциалом ионизации обладают большими сечениями ударной ионизации, которые в максимуме могут составлять несколько сотен

квадратных ангстрем. В случае многозарядных положительных ионов с большим потенциалом ионизации сечение рассматриваемого процесса может быть весьма малым.

Сечение ионизации атомов электронным ударом определяет важную величину, входящую в кинетические уравнения для плазмы, которая называется скоростью процесса и определяется выражением

$$k_i(T_e) = \int \sigma_i(E) v_e(E) F_e(E, T_e) dE, \quad (12.17)$$

где $F_e(E, T_e)$ — функция распределения электронов плазмы по энергиям при заданной температуре электронной подсистемы T_e ; $v_e(E)$ — скорость (нерелятивистского) электрона,

$$v_e(E) = \sqrt{2m_e E}.$$

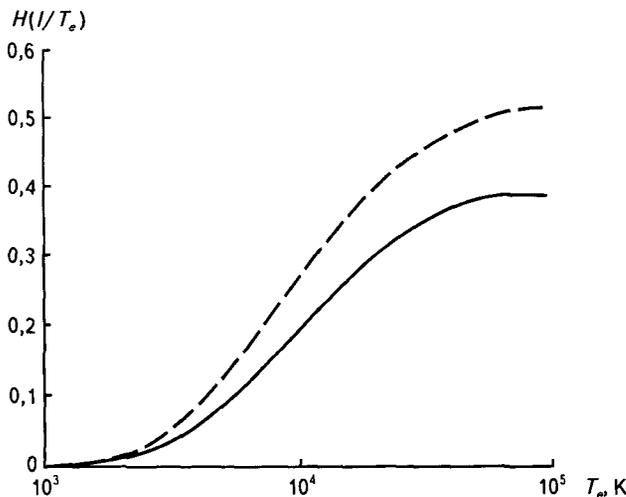


Рис. 12.4. Зависимость функции $H(I/T_e)$ [см. формулу (12.20)] от электронной температуры, вычисленная с помощью функции подобия Елецкого—Смирнова (сплошная кривая) и Борна—Комптона (пунктирная) для потенциала ионизации атома водорода

Величина (12.17) называется константой парного процесса, поскольку определяет скорость процесса, возникающего при парном взаимодействии частиц. Характерное значение константы парного процесса в атомной физике равно $k_0 \cong 6 \cdot 10^{-9}$ см³/с.

Используя универсальное выражение (12.13) для сечения ионизации атома, легко оценить константу скорости процесса для максвелловской функции распределения электронов по энергиям:

$$F_e(E, T_e) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{(T_e)^{3/2}} \exp\left[-\frac{E}{T_e}\right], \quad (12.18)$$

где T_e выражено в энергетических единицах. Подставляя формулы (12.13) и (12.18) в выражение (12.17), получаем

$$k_i(T_e) = \frac{2}{\pi} \sum_{nl} \sqrt{2m_e I_{nl}} \left(\frac{e^2}{I_{nl}}\right)^2 H\left(\frac{I_{nl}}{T_e}\right), \quad (12.19)$$

где электронная температура входит в безразмерную функцию

$$H(y) = y^{3/2} \int_1^{\infty} f(x) e^{-xy} x dx, \quad (12.20)$$

зависящую от функции подобия $f(x)$. $H(y)$ достигает максимума при значениях аргумента $y = 0,06-0,08$, т. е. при температуре $T_{\max} = (12-15)I$. Заметим, что при таких температурах атом уже ионизирован. Зависимости $H(I/T)$, вычисленные по функциям подобия Елецкого—Смирнова и Борна—Комптона для потенциала ионизации атома водорода, приведены на рис. 12.4.

12.4. КЛАССИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ УДАРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ АТОМА

Возбуждение атомов при столкновении с электронами — другой пример неупругого столкновительного процесса, играющего важную роль в различных областях физики и техники. В отличие от ударной ионизации, когда атомный электрон возбуждается в непрерывный энергетический спектр, соответствующий инфинитному движению, в случае возбуждения атомный электрон переходит в состояние дискретного спектра, т. е. (в рамках классической картины) на другую атомную орбиту с большей энергией. Это явление ответственно за излучение фотонов в плазме, возникающее в результате обратного перехода атомного электрона из возбужденно-

го состояния в основное. Оно является одним из механизмов создания инверсии населенностей в газовых лазерах в случае так называемой электронной накачки.

Уравнение рассматриваемого процесса имеет вид



где символ A^* обозначает атом в возбужденном состоянии дискретного спектра. Для расчета сечения реакции (12.21) воспользуемся спектроскопическим принципом соответствия между квантовой и классической физикой. Согласно этому принципу атом при взаимодействии с электромагнитным полем ведет себя как набор осцилляторов, которые ставятся в соответствие паре энергетических уровней E_i и E_j атомного спектра. Для определенности полагаем $E_i < E_j$. Собственные частоты этих осцилляторов равны собственной частоте перехода $i \rightarrow j$:

$$\omega_{ji} = \frac{E_j - E_i}{\hbar},$$

а эффективность их взаимодействия с электромагнитным полем определяется силой осциллятора:

$$f_{ji} = \frac{2m\omega_{ji} |\mathbf{d}_{ji}|^2}{3\hbar e^2 g_i}, \quad (12.22)$$

где g_i — статистический вес начального состояния. В (12.22) введены индексы, характеризующие принадлежность осциллятора заданному переходу между атомными уровнями энергии. В этой связи рассматриваемый осциллятор иногда называют осциллятором перехода. При квантово-механическом описании дипольный момент осциллятора перехода \mathbf{d}_{ji} представляет собой матричный элемент оператора электрического дипольного момента, вычисленный между состояниями $|i\rangle$ и $|j\rangle$. В случае возбуждения атома $\omega_{ji} > 0$ и $f_{ji} > 0$; для электронного перехода с уменьшением энергии ($\omega_{ij} < 0$) $f_{ij} < 0$. Поскольку $|\mathbf{d}_{ji}| = |\mathbf{d}_{ij}|$, то из определения (12.22) вытекает равенство $g_i f_{ji} = -g_j f_{ij}$.

Итак, возбуждению атома на переходе $i \rightarrow j$ при столкновении с электроном отвечает взаимодействие между электрическим полем рассеивающегося электрона и осциллятором перехода. Предполагая

поле налетающего электрона в области локализации атома однородным, можно записать следующее уравнение для радиуса-вектора осциллятора \mathbf{r}_{ji} :

$$\ddot{\mathbf{r}}_{ji} + \gamma_{ji}\dot{\mathbf{r}}_{ji} + \omega_{ji}^2\mathbf{r}_{ji} = f_{ji}\frac{e}{m}\mathbf{E}(t, \rho), \quad (12.23)$$

где γ_{ji} — константа затухания; $\mathbf{E}(t, \rho)$ — напряженность электрического поля, которое создает налетающий электрон, движущийся по траектории с прицельным параметром ρ , в месте расположения атома.

В данном разделе предполагается, что $f_{ji} \neq 0$. Соответствующие переходы называются дипольно- (или оптически) разрешенными. В противном случае говорят о дипольно- (оптически) запрещенном переходе.

Для Фурье-образа скорости осциллятора перехода из уравнения (12.23) легко получить следующее выражение:

$$v_{ji}(\omega) = f_{ji}\frac{e(-i\omega_{ji})\mathbf{E}(\omega, \rho)}{m\omega_{ji}^2 - \omega^2 - i\gamma_{ji}\omega}, \quad (12.24)$$

где $\mathbf{E}(\omega, \rho)$ — Фурье-компонента напряженности электрического поля рассеивающегося электрона. Чтобы найти сечение возбуждения атома на переходе $i \rightarrow j$, вычислим работу, которую совершает налетающий электрон над осциллятором перехода за все время столкновения:

$$A_{ji}(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} e v_{ji}(t) \mathbf{E}(t, \rho) dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e v_{ji}(\omega) \mathbf{E}^*(\omega, \rho) d\omega. \quad (12.25)$$

Здесь во втором равенстве мы перешли к Фурье-компонентам, воспользовались соотношением $\mathbf{E}(-\omega, \rho) = \mathbf{E}^*(\omega, \rho)$ и интегральным представлением дельта-функции:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) dt = 2\pi\delta(\omega). \quad (12.26)$$

Подчеркнем, что выражение (12.25) справедливо для достаточно больших прицельных параметров $\rho > a$, где a — длина «обрезания», когда можно пренебречь проникновением налетающего электрона

трона в атомный остов. Анализ показывает, что именно такие «далекие» столкновения вносят основной вклад в сечение процесса при возбуждении дипольно-разрешенного перехода. В дальнейшем полагаем $A_{ji}(\rho < a) = 0$. Параметр обрезания a равен нескольким радиусам Бора, его точное значение зависит от атома и возбуждаемого перехода.

Подставляя (12.24) в (12.25) и переходя к интегрированию по положительным частотам, получаем

$$A_{ji}(\rho) = f_{ji} \frac{e^2}{2m_0} \int_0^{\infty} G_{ji}^{(h)}(\omega - \omega_{ji}) |E(\omega, \rho)|^2 d\omega, \quad (12.27)$$

где $G_{ji}^{(h)}(\Delta\omega)$ — функция формы спектральной линии перехода при однородном уширении,

$$G_{ji}^{(h)}(\Delta\omega) = \frac{\gamma_{ji}/2\pi}{\Delta\omega^2 + (\gamma_{ji}/2)^2}. \quad (12.28)$$

Видно, что константа затухания γ_{ji} определяет спектральную ширину линии. Функция (12.28) удовлетворяет предельному соотношению

$$G_{ji}^{(h)}(\Delta\omega, \gamma_{ji} \rightarrow 0) \rightarrow \delta(\Delta\omega). \quad (12.29)$$

Спектральная ширина функции $|E(\omega, \rho)|^2$, стоящей под знаком интеграла в (12.27), определяется отношением v/ρ . Эта величина много больше ширины спектральной линии атомного перехода γ_{ji} для актуальных значений параметров задачи $\rho > a$ и

$$v > \sqrt{\frac{2\hbar\omega_{ji}}{m}}.$$

Поэтому в рассматриваемом случае можно пользоваться формулой (12.29).

Вероятность возбуждения перехода $i \rightarrow j$ при рассеянии электрона с прицельным параметром ρ на атоме равна отношению

$$W_{ji}(\rho) = \frac{A_{ji}(\rho)}{\hbar\omega_{ji}}, \quad (12.30)$$



где $\hbar\omega_{ji} = \Delta E_{ji}$ — энергия возбуждения атома. Анализ показывает, что $W_{ji} < 1$ в рассматриваемом диапазоне изменения величин ρ и v , как и должно быть в соответствии с физическим смыслом вероятности.

Интегральное по прицельному параметру сечение процесса определяется равенством

$$\sigma_{ji} = 2\pi \int_a^{\infty} W_{ji}(\rho) \rho d\rho. \quad (12.31)$$

Здесь верхний предел интегрирования по прицельному расстоянию положен равным бесконечности в соответствии с классической схемой рассмотрения. Подставляя в (12.31) формулы (12.30) и (12.27), находим с учетом (12.29):

$$\sigma_{ji} = \pi f_{ji} \frac{e^2}{m\Delta E_{ji}} \int_a^{\infty} |E(\omega_{ji}, \rho)|^2 \rho d\rho. \quad (12.32)$$

Дальнейшее рассмотрение проведем в *приближении прямопролетных траекторий*, когда легко получить выражение для Фурье-компоненты поля налетающего электрона:

$$E(\omega, \rho) = \frac{2e}{\rho v} \left\{ F\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_n - iF'\left(\frac{\omega\rho}{v}\right) \mathbf{e}_\tau \right\}, \quad (12.33)$$

где $\mathbf{e}_{n, \tau}$ — нормальный и тангенциальный (по отношению к вектору скорости $v = \text{const}$) единичные векторы;

$$F(\zeta) = \int_0^{\infty} \frac{\cos(\zeta x)}{(1+x^2)^{3/2}} dx; \quad (12.34)$$

штрих обозначает дифференцирование по аргументу.

Подставляя (12.33) и (12.34) в (12.32), получаем выражение для сечения ударного возбуждения как функцию энергии налетающего электрона $E = mv^2/2$:

$$\sigma_{ji}(E) = 2\pi f_{ji} \left(\frac{e^2}{\Delta E_{ji}} \right)^2 \frac{\Delta E_{ji}}{E} \int_1^{\infty} H\left(\frac{\omega_{ji} a \tilde{\rho}}{\sqrt{2E/m}}\right) \frac{d\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}}, \quad (12.35)$$

где $H(\nu)$ — спектральная функция напряженности электрического поля налетающего электрона (рис. 12.5),

$$H(\nu) = F^2(\nu) + F'^2(\nu). \quad (12.36)$$

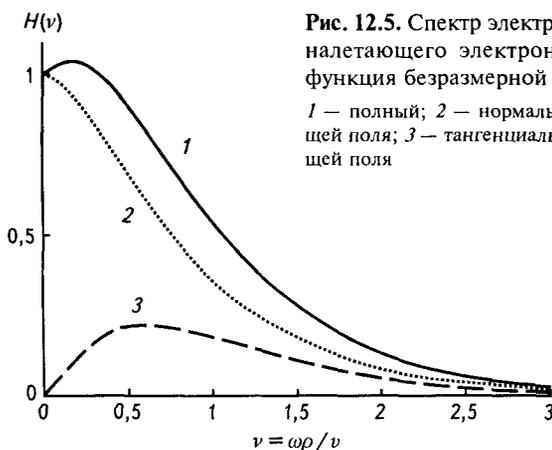


Рис. 12.5. Спектр электрического поля налетающего электрона (12.33) как функция безразмерной частоты:

1 — полный; 2 — нормальной составляющей поля; 3 — тангенциальной составляющей поля

В (12.35) введено интегрирование по безразмерной переменной

$$\tilde{\rho} = \frac{\rho}{a}.$$

Из (12.35) и (12.36) следует, что спектр электрического поля рассеивающегося электрона зависит от безразмерного параметра

$$\nu = \frac{\omega\rho}{v}.$$

Из рис. 12.5 видно, что основной вклад в спектральную функцию $H(\nu)$ в области ее больших значений дает нормальная составляющая электрического поля электрона, а ширина спектра порядка отношения v/ρ .

Формулу для сечения столкновительного возбуждения атома (12.35) удобно переписать в виде

$$\sigma_{ji}(E) = 2\pi f_{ji} \left(\frac{e^2}{\Delta E_{ji}} \right)^2 \varphi \left(\frac{E}{\Delta E_{ji}}, \eta \right), \quad (12.37)$$

где $\varphi(x, \eta)$ — безразмерная функция отношения $E/\Delta E_{ji}$,

$$\varphi(x, \eta) = \frac{1}{x} \int_1^{\infty} H\left(\frac{\eta \tilde{\rho}}{\sqrt{x}}\right) \frac{d\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}}, \quad (12.38)$$

зависящая от одного безразмерного параметра

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{a}{a_B} \sqrt{\frac{\Delta E_{ji}}{2 Ry}}, \quad (12.39)$$

где $Ry = 13,6$ эВ; $a_B = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см — радиус Бора. Численное значение η зависит от величины длины обрезания a и может рассматриваться как параметр теории.

Выражение (12.30) для вероятности возбуждения атома за все время рассеяния электрона можно переписать в виде

$$W_{ji}(\rho) = \int_0^{\infty} \sigma_{ji}^{(ph)}(\omega) \frac{dN(\omega, \rho)}{dS d\omega} d\omega, \quad (12.40)$$

где $\sigma_{ji}^{(ph)}(\omega)$ — сечение фотопоглощения атома на переходе $i \rightarrow j$,

$$\sigma_{ji}^{(ph)}(\omega) = f_{ji} \frac{2\pi^2 e^2}{mc} G_{ji}^{(h)}(\omega); \quad (12.41)$$

величина, которую можно интерпретировать как число фотонов электрического поля налетающего электрона, которое за все время столкновения проходит через единицу площади в единичный частотный интервал:

$$\frac{dN(\omega, \rho)}{dS d\omega} = \frac{c}{(2\pi)^2} \frac{|E(\omega, \rho)|^2}{\hbar\omega}. \quad (12.42)$$

Опираясь на формулы (12.40)—(12.42), процесс столкновительного возбуждения атома можно представить как поглощение атомом фотонов, составляющих собственное поле рассеивающейся заряженной частицы. Такие фотоны называются эквивалентными. Знание сечения фотопоглощения, например, из эксперимента и числа эквивалентных фотонов позволяет получить сечение процесса в соответствии с (12.40). Этот подход был использован Э. Ферми в 1924 г.

(еще до создания квантовой механики) для расчета возбуждения атомов быстрыми заряженными частицами [4]. Он получил название *метод эквивалентных фотонов Ферми*.

12.5. МЕТОД ФУНКЦИИ ПОДОБИЯ ДЛЯ УДАРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ АТОМА

Полученные в предыдущем разделе формулы (12.37)—(12.39) для сечения столкновительного возбуждения дипольно-разрешенного перехода в атоме в приближении прямопролетных траекторий справедливы для достаточно больших энергий налетающего электрона $E \gg \Delta E_{ji}$. Вблизи порога возбуждения $E \approx \Delta E_{ji}$ электрон тратит практически всю кинетическую энергию, так что приближение $v = \text{const}$ становится заведомо неверным. Анализ показывает, что выражение (12.37) можно распространить на весь диапазон энергий налетающего электрона, если соответствующим образом подобрать функцию $\varphi(E/\Delta E_{ji})$. Этот выбор может быть произведен эмпирическим путем на основании сравнения с экспериментальными данными и с привлечением общих теоретических положений. В основе данного подхода лежит предположение о том, что отношение

$$\varphi\left(\frac{E}{\Delta E_{ji}} \equiv x\right) = \frac{\sigma_{ji}(E)}{2\pi f_{ji} (e^2/\Delta E_{ji})^2} \quad (12.43)$$

является универсальной функцией безразмерной переменной $x = E/\Delta E_{ji}$. Равенство (12.43) выражает сущность *метода функции подобия* при расчете сечения столкновительного возбуждения атома.

Квантово-механическое рассмотрение показывает, что функция подобия $\varphi(x)$ должна удовлетворять двум предельным соотношениям:

$$\varphi(x \rightarrow 1) \propto \sqrt{x-1}; \quad \varphi(x \gg 1) \propto \frac{\ln(x)}{x}. \quad (12.44)$$

С учетом (12.44) для $\varphi(x)$ можно записать [5]

$$\varphi(x) = \frac{\ln(1 + a\sqrt{x-1})}{x+b}. \quad (12.45)$$

Значения параметров a и b устанавливается на основании сравнения с экспериментом, что дает $a = 0,5$, $b = 3$. Отметим отличие околорогового поведения функции подобия для возбуждения атома

$$\varphi(x \approx 1) \propto \sqrt{x-1}$$

от соответствующей зависимости для ионизации атома электронным ударом

$$f(x \approx 1) \propto x-1.$$

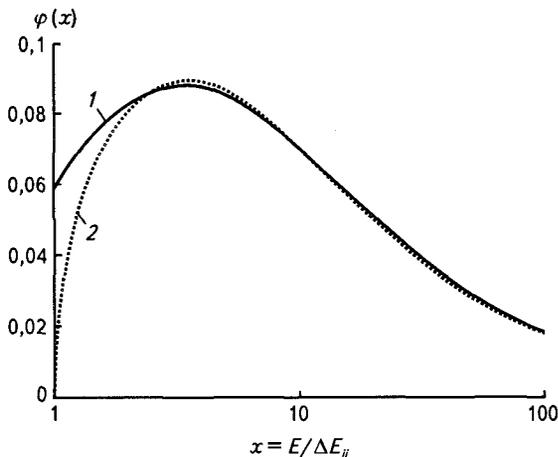


Рис. 12.6. Функция подобия, вычисленная в приближении прямопролетных траекторий (1) и функция подобия (2) для сечения столкновительного возбуждения дипольно-разрешенного перехода в атоме

Интересно сравнить функцию подобия (12.45) с выражением, полученным в приближении прямопролетных траекторий (12.38), (12.36). Это сравнение для значения параметра η , определенного равенством (12.39), $\eta = 1,7$, приведено на рис. 12.6. Из данного рисунка следует, что в широком диапазоне $x > 3$ наблюдается практическое совпадение обеих функций. В частности, совпадает положение максимумов $x_{\max} \cong 3,45$ и максимальные значения $\varphi_{\max} \cong 0,09$. Заметное отличие имеет место только в припороговой области $1 < x < 2$, где приближение прямопролетных траекторий неадекватно.

Итак, сечение столкновительного возбуждения дипольно-разрешенного перехода в атоме для произвольных энергий налетающего электрона, включая околороговую область, можно представить в виде

$$\sigma_{ji}(E) = 2\pi\sigma_a f_{ji} \left(\frac{2 Ry}{\Delta E_{ji}} \right)^2 \varphi \left(\frac{E}{\Delta E_{ji}} \right), \quad (12.46)$$

где функция подобия $\varphi(x)$ дается формулой (12.45). При записи (12.46) мы перешли к атомным единицам, в которых $e = 1$, $E_a = 2Ry \cong 27,2$ эВ и $\sigma_a = a_B^2 \cong 2,8 \cdot 10^{-17}$ см² — атомная единица сечения. В максимуме энергетической зависимости формула (12.46) с учетом вышеприведенных значений для x_{\max} , φ_{\max} дает

$$\sigma_{ji}(E_{\max} = 3,45\Delta E_{ji}) \cong 0,63 \cdot 10^{-16} f_{ji} \left(\frac{Ry}{\Delta E_{ji}} \right), \text{ см}^2. \quad (12.47)$$

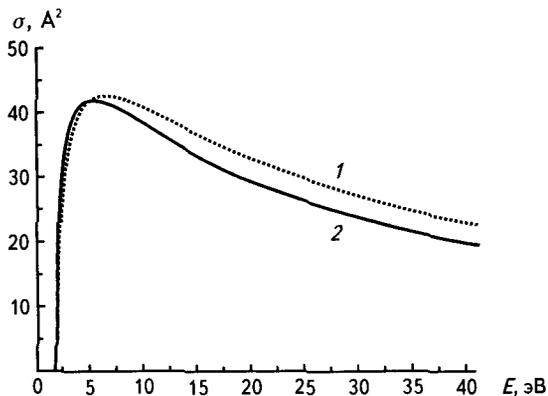


Рис. 12.7. Сечение возбуждения атома лития электронным ударом на переходе $2s \rightarrow 2p$:

1 — экспериментальные данные Национального института стандартов (США) [6]; 2 — расчет методом функции подобия

Таким образом, сечение столкновительного возбуждения дипольно-разрешенного перехода прямо пропорционально силе осциллятора перехода и обратно пропорционально квадрату энергии возбуждения. Характерное значение энергии перехода в нейтральном

атоме 1—10 эВ. Сила осциллятора изменяется в более широких пределах: от 10^{-6} до 2. При $f_{ji} < 10^{-6}$ электронный переход в атоме можно считать запрещенным. Максимальное значение $f_{ji} \cong 2$ достигается для переходов без изменения главного квантового числа в атомах щелочно-земельных элементов.

На рис. 12.7 показаны экспериментальное (кривая 1) и вычисленное по формуле (12.46) (кривая 2) сечения возбуждения перехода $2s \rightarrow 2p$ в атоме лития. Рассматриваемый переход без изменения главного квантового числа имеет большую силу осциллятора $f_{2p2s} = 0,75$ и относительно низкую энергию возбуждения $\Delta E_{2p2s} \approx 1,85$ эВ. Поэтому максимальное значение сечения весьма велико $\sigma_{\max} \approx 4,3 \cdot 10^{-15}$ см², а положение максимума соответствует примерно 7,5 эВ.

Видно, что соответствие теории и эксперимента весьма хорошее, особенно вблизи порога.

12.6. ВОЗБУЖДЕНИЕ ДИПОЛЬНО-ЗАПРЕЩЕННЫХ ПЕРЕХОДОВ В АТОМАХ

В предыдущем разделе рассматривалось столкновительное возбуждение дипольно-разрешенных переходов в атомах, которые можно описывать классически с помощью понятия осциллятора перехода. В случае дипольно-запрещенных переходов такого рода расчет не применим, поскольку $f_{ji} = 0$. Тогда взаимодействие между налетающим электроном и возбуждаемым переходом носит иной, *недипольный* характер.

Дипольно-запрещенные переходы бывают двух типов:

- 1) без изменения спина атома;
- 2) с изменением атомного спина.

В первом случае дипольный момент перехода отсутствует из-за невыполнения правил отбора по орбитальному квантовому числу L : $|L_j - L_i| > 1$ или $L_i = L_j = 0$. Возбуждение атома на таком переходе осуществляется за счет *прямого* кулоновского взаимодействия налетающего электрона с квадрупольным или другими более высокими мультипольными моментами.

Зависимости сечения ударного возбуждения переходов первого типа от энергии налетающего электрона E в припороговой области

($x = E/\Delta E_{ji} \approx 1$) и для больших энергий ($x \gg 1$) те же, что и у дипольно-разрешенных переходов [см. (12.45)]. С учетом этого обстоятельства наиболее простую аппроксимацию сечения возбуждения дипольно-запрещенного перехода *без изменения спина* можно представить в форме

$$\sigma_{ji} \left(x = \frac{E}{\Delta E_{ji}} \right) = c \frac{\sqrt{x-1}}{a+x^{3/2}}, \quad (12.48)$$

где a, c — параметры, которые определяют энергию налетающего электрона в максимуме $E_{\max} = \Delta E_{ji} x_{\max}$ и величину максимума сечения σ_{\max} . Заметим, что формула (12.48) может быть использована для приближенного описания сечения дипольно-разрешенного перехода. Как правило, максимальное сечение σ_{\max} для дипольно-запрещенных переходов без изменения атомного спина существенно меньше аналогичной величины для дипольно-разрешенных переходов. Максимум сечения дипольно-запрещенных переходов сдвинут в область меньших энергий по сравнению с дипольно-разрешенными переходами, так что в большинстве случаев $1,5 < x_{\max} < 2$, причем с ростом энергии возбуждения величина x_{\max} уменьшается.

Передача энергии, при которой происходит обменное возбуждение атома на переходе $i \rightarrow j$, определяется неравенствами

$$E + |E_j| \leq \Delta E \leq E + |E_i|. \quad (12.49)$$

Напомним, что связанным состояниям атомных электронов соответствуют отрицательные энергии $E_{i,j} < 0$. Предлагаемое здесь простое классическое рассмотрение справедливо вдали от порога $x \gg 1$, когда в соответствии с (12.49) передача энергии от налетающего электрона атомному много больше энергии возбуждения: $\Delta E \gg \Delta E_{ji}$. Таким образом, обменное взаимодействие существенно более сильное, чем прямое, когда $\Delta E = \Delta E_{ji}$. Оно происходит на малых расстояниях от атомного ядра, порядка размеров орбиты возбуждаемого электрона, в отличие от электрон-дипольного взаимодействия при возбуждении дипольно-разрешенных переходов, происходящего на больших расстояниях от атома.

В соответствии с вышеприведенной физической картиной для расчета сечения столкновительного возбуждения интеркомбинаци-

онного перехода можно воспользоваться выражением (12.6) для сечения передачи энергии при резерфордском рассеянии электрона на электроне. Производя в этой формуле интегрирование с пределами, определенными неравенством (12.49), находим

$$\sigma_{ji}^{(inter)}(E \gg \Delta E_{ji}) = \frac{\pi e^4}{E} \frac{\Delta E_{ji}}{(E + |E_j|)(E + |E_i|)}. \quad (12.50)$$

Это равенство удобно переписать через безразмерную переменную $x = E/\Delta E_{ji}$. Тогда из (12.50) следует асимптотическое выражение для сечения интеркомбинационного перехода в высокоэнергетическом интервале $E \gg |E_i|$:

$$\sigma_{ji}^{(inter)}(E \gg |E_i|) = \frac{\pi e^4}{(\Delta E_{ji})^2} \frac{1}{x^3}. \quad (12.51)$$

Отсюда следует, что при больших энергиях налетающего электрона сечение возбуждения интеркомбинационного перехода убывает быстрее, чем сечение возбуждения атома без изменения спина (12.48). Это обстоятельство связано с необходимостью передачи большой величины энергии при обменном взаимодействии [см. неравенства (12.49)], обуславливающим интеркомбинационное возбуждение.

В припороговой области энергий $x = E/\Delta E_{ji} \approx 1$ для рассматриваемого сечения справедлива та же асимптотика, что и в предыдущих случаях:

$$\sigma \propto \sqrt{x - 1},$$

поскольку она вытекает из квантово-механических принципов, общих для переходов между связанными состояниями электронов в атоме. Комбинируя предельные случаи по аналогии с выводом формулы (12.48), можно получить следующую простую аппроксимацию для сечения возбуждения интеркомбинационного перехода в атоме электронным ударом [5]:

$$\sigma_{ji}^{(inter)}\left(x = \frac{E}{\Delta E_{ji}}\right) = c \frac{\sqrt{x - 1}}{a + x^{7/2}}, \quad (12.52)$$

где a и c — параметры, характеризующие возбуждаемый переход. Полученное выражение справедливо в широком диапазоне энергий налетающей частицы вплоть до релятивистских значений. На рис. 12.8 представлено сечение столкновительного возбуждения интеркомбинационного перехода $3s^1S \rightarrow 3p^3P$ в атоме магния, рассчитанное по формуле (12.52) для $c = 2 \cdot 10^{-14}$ см², $a = 10$ и измеренное в эксперименте.

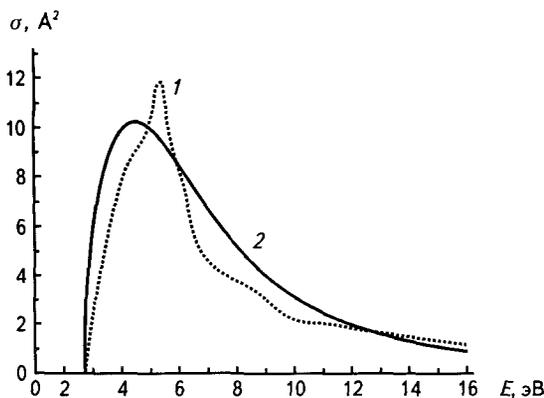


Рис. 12.8. Сечение возбуждения электронным ударом интеркомбинационного перехода $3s^1S \rightarrow 3p^3P$ в атоме магния:
 1 — экспериментальные данные [6]; 2 — модельное сечение (12.52)

В исходном состоянии на $3s$ -подоболочке атома магния находятся два валентных электрона с антипараллельными спинами, так что суммарный спин равен нулю. (Суммарный спин заполненных оболочек равен нулю.) В ходе столкновения с налетающим электроном один из валентных $3s$ -электронов за счет обменного взаимодействия возбуждается на $3p$ -подоболочку с переворотом спина, в результате чего квантовое число суммарного атомного спина становится равным единице. Таким образом происходит интеркомбинационный переход. Из рис. 12.8 видно, что величина сечения рассматриваемого перехода в максимуме весьма велика, а $x_{\max} = E_{\max}/\Delta E_{ji} \approx 1,85$, что заметно меньше, чем в случае дипольно-разрешенных переходов, когда $x_{\max} \approx 3,45$. Значительная величина максимального сечения в данном случае обусловлена относительно низким значением порога возбуждения $\Delta E_{ji} \approx 2,7$ эВ, как это следует из формулы (12.51).



Литература

1. *Астапенко В.А., Лисица В.С.* Столкновительные процессы в низкотемпературной плазме. Учебное пособие. М.: Изд. МФТИ, 2007, 127 с.
2. *Astapenko V.A.* Impact ionization of atoms: calculation in the Born-Compton approximation. *Laser Physics*, 2001. V. 11, № 12, pp. 1336—1342.
3. *Kim Y.-K., Rudd M.E.* Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization. *Phys. Rev. A*, 1994, V. 50, pp. 3954—3967.
4. *Ферми Э.* К теории столкновений атомов с электрически заряженными частицам. Научные труды. Т. 1. М: Наука, 1971, с. 166—177.
5. *Astapenko V., Eletskaa A., Kudrya V., Ventzek P.* Calculation of the cross-sections for electron impact excitation of magnesium. *Laser Physics*, 2000, V. 10, № 6, pp. 1220—1226.
6. <http://www.nist.gov>.



Б. Салех, М. Тейх Основы фотоники

В двух томах с CD

Учебник, перевод второго издания
на английском языке

Около 2000 с., формат 70x100/16, переплет

Глава 1. ОПТИКА ЛУЧЕЙ

- 1.1. Постулаты лучевой оптики
- 1.2. Простые оптические элементы
- 1.3. Оптика сред с плавно меняющимся показателем преломления
- 1.4. Матричная оптика

Глава 2. ОПТИКА ВОЛН

- 2.1. Постулаты волновой оптики
- 2.2. Монохроматические волны
- 2.3. Соотношение между волновой и лучевой оптикой
- 2.4. Простые оптические элементы
- 2.5. Интерференция
- 2.6. Полихроматический и импульсный свет

Глава 3. ОПТИКА ПУЧКОВ

- 3.1. Гауссов пучок
- 3.2. Прохождение через оптические элементы
- 3.3. Пучки Гаусса-Эрмита
- 3.4. Пучки Гаусса-Лагерра и Бесселя

Глава 4. ФУРЬЕ-ОПТИКА

- 4.1. Распространение света в свободном пространстве
- 4.2. Оптическое преобразование Фурье
- 4.3. Дифракция света
- 4.4. Формирование изображения
- 4.5. Голография

Глава 5. ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ОПТИКА

- 5.1. Электромагнитная теория света
- 5.2. Электромагнитные волны в диэлектрических средах
- 5.3. Монохроматические электромагнитные волны
- 5.4. Элементарные электромагнитные волны
- 5.5. Поглощение и дисперсия
- 5.6. Распространение импульса в диспергирующей среде
- 5.7. Оптика магнитных материалов и метаматериалов

Глава 6. ПОЛЯРИЗАЦИОННАЯ ОПТИКА

- 6.1. Поляризация света
- 6.2. Отражение и преломление
- 6.3. Оптика анизотропных сред
- 6.4. Оптическая активность и магнитооптика
- 6.5. Оптика жидких кристаллов
- 6.6. Поляризационные устройства

Глава 7. ОПТИКА ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

- 7.1. Оптика диэлектрических слоистых сред
- 7.2. Одномерные фотонные кристаллы
- 7.3. Двух- и трехмерные фотонные кристаллы

Глава 8. ОПТИКА ВОЛНОВОДОВ

- 8.1. Планарные зеркальные волноводы
- 8.2. Планарные диэлектрические волноводы
- 8.3. Двумерные волноводы
- 8.4. Фотонно-кристаллические волноводы
- 8.5. Оптическая связь в волноводах
- 8.6. Металлические волноводы с размерами меньше длины волны (плазмоника)

Глава 9. ВОЛОКОННАЯ ОПТИКА

- 9.1. Направляемые лучи
- 9.2. Направляемые волны
- 9.3. Ослабление и дисперсия
- 9.4. Микроструктурные и фотонно-кристаллические волокна

Глава 10. ОПТИКА РЕЗОНАТОРОВ

- 10.1. Резонаторы с плоскими зеркалами
- 10.2. Резонаторы со сферическими зеркалами
- 10.3. Двух- и трехмерные резонаторы
- 10.4. Микрорезонаторы

Глава 11. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОПТИКА

- 11.1. Статистические свойства случайного света
- 11.2. Интерференция частично когерентного света
- 11.3. Прохождение частично поляризованного света через оптические системы
- 11.4. Частичная поляризация

Глава 12.
ОПТИКА ФОТОНОВ

- 12.1. Фотон
- 12.2. Потоки фотонов
- 12.3. Квантовые состояния света

Глава 13.
ФОТОНЫ И АТОМЫ

- 13.1. Уровни энергии
- 13.2. Заселенность уровней энергии
- 13.3. Взаимодействие фотонов с атомами
- 13.4. Тепловое излучение
- 13.5. Люминесценция и рассеяние света

Глава 14.
ЛАЗЕРНЫЕ УСИЛИТЕЛИ

- 14.1. Теория лазерного усиления
- 14.2. Накачка усилителя
- 14.3. Распространенные лазерные усилители
- 14.4. Нелинейность усилителя
- 14.5. Шум усилителя

Глава 15. ЛАЗЕРЫ

- 15.1. Теория лазерной генерации
- 15.2. Выходные характеристики лазера
- 15.3. Распространенные лазеры
- 15.4. Импульсные лазеры

Глава 16.
ОПТИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

- 16.1. Полупроводники
- 16.2. Взаимодействие фотонов с носителями заряда

Глава 17.
**ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ
ИСТОЧНИКИ ФОТОНОВ**

- 17.1. Светодиоды
- 17.2. Полупроводниковые оптические усилители
- 17.3. Лазерные диоды
- 17.4. Квантоворазмерные лазеры и лазеры с микрорезонаторами

Глава 18.
**ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ
ДЕТЕКТОРЫ ФОТОНОВ**

- 18.1. Фотодетекторы
- 18.2. Фотопроводники
- 18.3. Фотодиоды
- 18.4. Лавинные фотодиоды
- 18.5. Матричные детекторы
- 18.6. Шум в фотодетекторах

Глава 19. АКУСТООПТИКА

- 19.1. Взаимодействие света и звука
- 19.2. Акустооптические устройства
- 19.3. Акустооптика анизотропных сред

Глава 20. ЭЛЕКТРООПТИКА

- 20.1. Принципы электрооптики
- 20.2. Электрооптика анизотропных сред
- 20.3. Электрооптика жидких кристаллов
- 20.4. Фоторефрактивность

Глава 21. НЕЛИНЕЙНАЯ ОПТИКА

- 21.1. Нелинейные оптические среды
- 21.2. Нелинейная оптика второго порядка
- 21.3. Нелинейная оптика третьего порядка
- 21.4. Нелинейная оптика второго порядка: теория связанных волн
- 21.5. Нелинейная оптика третьего порядка: теория связанных волн
- 21.6. Анизотропные нелинейные среды
- 21.7. Нелинейные среды с дисперсией

Глава 22.
ОПТИКА УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ

- 22.1. Характеристики импульсов
- 22.2. Формирование и компрессия импульсов
- 22.3. Распространение импульсов в оптических волокнах
- 22.4. Линейная оптика ультракоротких импульсов
- 22.5. Нелинейная оптика ультракоротких импульсов

Глава 23.
**ОПТИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ
И ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛИ**

- 23.1. Оптические соединения
- 23.2. Пассивные оптические маршрутизаторы
- 23.3. Фотонные переключатели
- 23.4. Оптические затворы

Глава 24.
**ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЕ
СИСТЕМЫ СВЯЗИ**

- 24.1. Волоконно-оптические компоненты
- 24.2. Волоконно-оптические системы связи
- 24.3. Модуляция и мультиплексирование
- 24.4. Волоконно-оптические сети
- 24.5. Когерентные оптические системы связи

Дополнение А.
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

- А.1. Одномерное преобразование Фурье
- А.2. Длительность и спектральная ширина
- А.3. Двумерное преобразование Фурье

Дополнение В.
ЛИНЕЙНЫЕ СИСТЕМЫ

- В.1. Одномерные линейные системы
- В.2. Двумерные линейные системы

Дополнение С.
**МОДЫ КОЛЕБАНИЙ И ВОЛН
В ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ**

Обозначения и единицы измерения

Об авторах

Предметный указатель

Список рекомендуемой литературы на русском языке

Ко всем главам даны перечни литературы на языке оригинала

В каждой главе даны задачи

Вышли в свет



Н. Я. Молотков

Учебные эксперименты по волновой оптике.

СВЧ демонстрации

Пособие содержит описание лекционных демонстраций по основным и принципиально важным оптическим явлениям в диапазоне СВЧ ($\lambda = 3,2\text{ см}$). Демонстрационные опыты включают учебные исследования свойств электромагнитных волн и охватывают все основные разделы волновой оптики: интерференцию, дифракцию, поляризацию и дисперсию. Большое внимание уделяется моделированию кристаллооптических явлений и иллюстрации основных методов и принципов рентгеноструктурного анализа. Описание каждой демонстрации помимо рассмотрения физического явления включает рекомендации по методике и технике лекционного эксперимента. Даются указания по изготовлению необходимого учебного оборудования.

Для преподавателей физики университетов, институтов и техникумов, работников физических кабинетов, студентов физических специальностей, учителей средних школ.

Г. Р. Локшин

Основы радиооптики

Серия «Физтеховский учебник»

Интерес к основам когерентной оптики и голографии и их применению резко усилился в последнее время. Стало понятно, что важнейшие перспективные задачи обработки информации могут решаться только оптическими, а не компьютерными методами, при этом в оптику переносятся многие подходы из радиотехники.

Учебное пособие дает современное и доходчивое изложение методов и приложений Фурье-оптики к задачам дифракции, формирования и изображений и пространственной фильтрации.

Для студентов, преподавателей и специалистов во многих областях прикладной математики и физики, разработчиков оптических приборов и систем распознавания образов.

**Полные оглавления книг
на сайте www.id-intellect.ru**

Учебное пособие

Заявки на книги присылайте по адресам:

zakaz@id-intellect.ru

solo@id-intellect.ru

id-intellect@mail.ru

тел. (495) 579-96-45

факс (495) 579-96-70

В заявке обязательно указывайте
свои реквизиты (для организаций) и почтовый адрес!

Подробная информация о книгах на сайте

<http://www.id-intellect.ru>

Валерий Александрович Астапенко

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С АТОМАМИ И НАНОЧАСТИЦАМИ

Компьютерная верстка – Н.А. Попова

Корректор – Г.Н. Петрова

Художник – С.Ю. Биричев

Ответственный за выпуск – Л.Ф. Соловейчик

Формат 60x90/16. Печать офсетная.

Гарнитура Ньютон.

Печ. л. 31. Тираж 1000 экз. Зак. № 1271

Бумага офсетная № 1, плотность 80 г/м²

Издательский Дом «Интеллект»

141700, Московская обл., г. Долгопрудный,

Промышленный пр-д, д. 14,

тел. (495) 617-41-85

Отпечатано в ООО «Чебоксарская типография № 1»
428019, г. Чебоксары, пр-т И. Яковлева, д. 15

ПЕРВЫЙ СОВРЕМЕННЫЙ
УЧЕБНИК ПО ФОТОНИКЕ
НА РУССКОМ ЯЗЫКЕ



АСТАПЕНКО
ВАЛЕРИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ
Заведующий кафедрой
Московского физико-технического
института.
Известный специалист по атомной
физике и фотонике.
Автор более 100 научных работ, 3
монографий и 7 учебных пособий.



ISBN 978-5-91559-083-9



www.id-intellect.ru