1.4. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом

1.4.1. Электрические и магнитные дипольные моменты и энергия взаимодействия микрочастиц с внешним полем

Рассмотрим взаимодействие электромагнитного поля с элементами вещества – атомами, молекулами или ионами. Такое взаимодействие возможно благодаря наличию у них дипольных, квадрупольных и мультипольных электрических и магнитных моментов. Для нейтрального атома, содержащего ядро и отрицательно заряженный электрон, дипольный момент равен:

$$\vec{p} = e\vec{r}, \qquad (1.4.1)$$

где $\vec{r}$ - радиус-вектор, соединяющий электрон с ядром, e - элементарный электрический заряд. Для более сложного атома полный дипольный момент может быть получен как векторная сумма частных моментов.

Если рассматриваемый атом находится во внешнем поле с электрической напряженностью $\vec{E}$, то энергия взаимодействия диполя с полем равна:

$$V = -\vec{p} \cdot \vec{E} \qquad (1.4.2)$$

При квантовомеханическом рассмотрении величины $\vec{p}$, $\vec{r}$ и $\vec{E}$ нужно заменить операторами. Мы будем пользоваться ***полуклассическим приближением,*** когда поле рассматривается классически (не квантуется):

$$V = -\vec{p} \cdot \vec{E} \quad , \qquad (1.4.3)$$

где $\vec{p} = e\vec{r}$ - оператор электродипольного момента. В энергетическом представлении $\vec{p}$ изображается матрицей с элементами:

$$\vec{p}_{mn} = \int \psi_m^* e\vec{r} \psi_n dV \quad , \qquad (1.4.4)$$

где $\psi_m(\vec{r}, t)$ - собственные функции оператора энергии.

Обычно функции ψ_m, входящие в (1.4.4), обладают определенной четностью, то есть каждая из этих функций либо четная, либо нечетная функция координат. Тогда при $m=n$ произведение $\psi_m^* \psi_m = |\psi_m|^2$ является четной функцией, а $\psi_m^* \vec{r} \psi_m$ - нечетная функция. Поэтому диагональные матричные элементы оператора электродипольного момента равны нулю:

$$\vec{p}_{mm} = 0 \ . \qquad (1.4.5)$$

Кроме того, те из $\vec{p}_{mn}$, которые соответствуют состояниям с одинаковой четностью, также равны нулю. Это означает, что ***электродипольные переходы между состояниями с одинаковой четностью запрещены.***

Если атом (частица) обладает магнитным моментом, то он также будет взаимодействовать с электромагнитным полем:

$$\hat{V} = -\hat{\mu} \cdot \vec{H} \ , \qquad (1.4.6)$$

за счет составляющей $\vec{H}$.

Самым сильным является электродипольное взаимодействие. Если же $\vec{p}_m = 0$, то следует учесть магнитодипольное взаимодействие. При $\vec{p}_{mn} = 0$ и $\hat{\mu}_{mn} = 0$ взаимодействие частицы с полем является слабым и осуществляется за счет квадрупольных и мультипольных электрических моментов.

1.4.2. Двухуровневая система микрочастиц во внешнем поле. Основные уравнения. Вероятности индуцированных переходов

Рассмотрим ансамбль микрочастиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле. Полагаем, что у данных частиц имеется пара энергетических уровней 1 и 2, расстояние между которыми $E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$ соответствует частоте $\omega_{21} \cong \omega$, близкой к частоте приложенного поля ω. Тогда наличием всех прочих уровней можно пренебречь и рассматривать данную систему как двухуровневую.

Нас интересует мощность P, поглощаемая веществом, которая, как было показано ранее, равна:

$$P = \hbar\omega W(N_1 - N_2) \qquad (1.4.7)$$

Здесь нам неизвестны как вероятность индуцированных переходов, так и населенности уровней N_1 и N_2. Последние можно выразить через диагональные элементы матрицы плотности: $N_k = \rho_{kk} N$, где N – полное число частиц.

Таким образом, расчет поглощаемой мощности связан с решением уравнений для матрицы плотности.

В случае двухуровневой системы общие уравнения для $\hat{\rho}$ существенно упрощаются. Найдем вначале матричные элементы оператора энергии взаимодействия микрочастицы с полем:

$$V_{11} = -\hat{p}_{11} \cdot \hat{E} = 0, V_{22} = -\hat{p}_{22} \cdot \hat{E} = 0,$$
$$V_{12} = -\hat{p}_{12} \cdot \hat{E}, V_{21} = -\hat{p}_{21} \cdot \hat{E}. \qquad (1.4.8)$$

С учетом этого запишем уравнения для матричных элементов ρ_{11} и ρ_{12} :

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{12}\rho_{11} + \frac{i}{\hbar}\left(\rho_{12}V_{21} - V_{12}\rho_{21}\right), \qquad (1.4.9)$$

$$\frac{d\rho_{12}}{dt} + \frac{\rho_{12}}{\tau} - i\omega_{21} = \frac{i}{\hbar}\left(\rho_{11}V_{12} - V_{12}\rho_{22}\right), \qquad (1.4.10)$$

где учтено: $\tau_{12} = \tau_{21} = \tau$.

Уравнения (1.4.9) и (1.4.10) содержат 4 неизвестных, ρ_{11}, ρ_{22}, ρ_{12} и ρ_{21}. Поэтому к ним нужно добавить еще 2 уравнения. В качестве таковых можно использовать общее соотношение, $Sp\hat{\rho} = 1$, которое в данном случае имеет вид:

$$\rho_{11} + \rho_{22} = 1, \qquad (1.4.11)$$

и учесть условие самосопряженности матрицы $\hat{\rho}$:

$$\rho_{12}^{*} = \rho_{21}. \qquad (1.4.12)$$

Система уравнений (1.4.9)-(1.4.12) позволяет определить все элементы матрицы плотности.

Для ее решения выпишем в явном виде значения V_{ik}. Для поля $\vec{E}(t) = \vec{E}_m \cos(\omega t)$ имеем:

$$V_{12} = -\frac{\vec{p}_{12} \cdot \vec{E}_m}{2}\left[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)\right]. \qquad (1.4.13)$$

Входящая в уравнение (1.4.10) вынуждающая сила в этом случае содержит две составляющие, пропорциональные $\exp(i\omega t)$ и $\exp(-i\omega t)$. Поскольку собственные колебания системы, определяемые левой частью (однородным уравнением), происходят по закону $\exp(-t/\tau)\exp(i\omega_{21}t)$, то основной вклад в решение даст «резонансное» слагаемое в (1.4.13), пропорциональное $\exp(i\omega t)$:

$$V_{12} \cong -\frac{\vec{p}_{12} \cdot \vec{E}_m}{2}\exp(i\omega t). \qquad (1.4.14)$$

Из условия самосопряженности находим:

$$V_{21} = V_{12}^{*} = -\frac{\vec{p}_{12}^{*} \cdot \vec{E}_m}{2} \exp(-i\omega t) \qquad (1.4.15)$$

Отыскивая решение в виде $\rho_{12} = \rho_{12}^{m} \exp(i\omega t)$, где ρ_{12}^{m} - медленно меняющаяся функция времени, так что ее производной можно пренебречь, из (1.4.10) находим:

$$\rho_{12}^{m} = -\frac{(i/\hbar)(\vec{p}_{12} \cdot \vec{E}_m / 2)}{1/\tau + i(\omega - \omega_{21})} (\rho_{11} - \rho_{22}). \qquad (1.4.16)$$

Учитывая соотношение $\left[(-i/\hbar)V_{12}\rho_{21}\right]=\left[(i/\hbar)V_{21}\rho_{12}\right]^{*}$, найдем последний член в правой части уравнения (1.4.9):

$$\frac{i}{\hbar}(\rho_{12}V_{21}-V_{12}\rho_{21})=-\frac{1}{4}\left|\frac{\vec{p}_{12}\cdot\vec{E}_m}{\hbar}\right|^2\left[\frac{1}{1/\tau+i(\omega-\omega_{21})}+\frac{1}{1/\tau-i(\omega-\omega_{21})}\right](\rho_{11}-\rho_{22})$$

$$=-\frac{(1/2\tau)\left|(\vec{p}_{12}\cdot\vec{E}_m)/\hbar\right|^2}{1/\tau^2+(\omega-\omega_{21})^2}(\rho_{11}-\rho_{22}).$$

Подставляя это выражение в (1.4.9) и вводя обозначения

$$W=\frac{\left|\Lambda\right|^2/(2\tau)}{1/\tau^2+(\omega-\omega_{21})^2},\quad \Lambda=\frac{\vec{p}_{12}\cdot\vec{E}_m}{\hbar}, \tag{1.4.17}$$

окончательно получаем:

$$\frac{d\rho_{11}}{dt}=(\Gamma_{21}+W)\rho_{22}-(\Gamma_{12}+W)\rho_{11}. \tag{1.4.18}$$

Рассмотрим физический смысл членов, входящих в данное уравнение.

В левой части определяется относительная скорость изменения числа частиц на нижнем уровне с энергией E_1. Первый член в правой части характеризует приток частиц на данный уровень. Тепловые (безызлучательные) переходы имеют вероятность Γ_{21}, а величина W определяет, очевидно, вероятность индуцированного перехода одной частицы в единицу времени.

Второе слагаемое в правой части (1.4.18), характеризующее отток частиц с уровня 1, показывает, что вероятности индуцированного перехода сверху вниз и снизу вверх одинаковы, и в случае двухуровневой системы частиц определяются формулами (1.4.17).

Определим мощность, поглощаемую двухуровневой системой, для стационарного случая, когда $d\rho_{11}/dt = d\rho_{22}/dt = 0$. Из (1.4.18) получаем:

$$(\Gamma_{21} + W)\rho_{22} - (\Gamma_{12} + W)\rho_{11} = 0. \qquad (1.4.19)$$

Используя соотношение (1.4.11), находим:

$$\rho_{11} = \frac{\Gamma_{21} + W}{\Gamma_{21} + \Gamma_{12} + 2W}, \quad \rho_{22} = \frac{\Gamma_{12} + W}{\Gamma_{21} + \Gamma_{12} + 2W}, \qquad (1.4.20)$$

$$\rho_{11} - \rho_{22} = \frac{\Gamma_{21} - \Gamma_{12}}{\Gamma_{21} + \Gamma_{12} + 2W}. \qquad (1.4.21)$$

Переписывая уравнение детального равновесия в виде

$$\frac{\rho_{11}^{e}}{\Gamma_{21}} = \frac{\rho_{22}^{e}}{\Gamma_{12}} = T_1, \qquad (1.4.22)$$

где величина T_1 имеет размерность времени и характеризует скорость релаксации за счет взаимодействия с термостатом, вместо (1.4.21) можно получить:

$$\rho_{11} - \rho_{22} = \frac{1}{1 + 2WT_1}(\rho_{11}^{e} - \rho_{22}^{e}). \qquad (1.4.23)$$

Таким образом, поглощаемая двухуровневой системой мощность может быть найдена в виде:

$$P = \hbar\omega_{21} W (N_1 - N_2) = \hbar\omega_{21} W N (\rho_{11}^e - \rho_{22}^e) =$$

$$= \hbar\omega_{21} N \frac{W}{1 + 2WT_1} (\rho_{11}^e - \rho_{22}^e). \qquad (1.4.24)$$

1.4.3. Анализ поглощения электромагнитного поля двухуровневой системой. Эффект насыщения

Применим общее выражение (1.4.24) для анализа двух предельных случаев.

1. Слабое поле, вероятность индуцированного перехода $W \ll 1/T_1$. Тогда слагаемым $2WT_1$ в знаменателе можно пренебречь. Подставляя в (1.4.24) для этого случая W из формулы (1.4.17), получаем:

$$P = \hbar\omega_{21} N(\rho_{11}^e - \rho_{22}^e)\frac{|\Lambda|^2/(2\tau)}{1/\tau^2 + (\omega - \omega_{21})^2}. \qquad (1.4.25)$$

Отсюда видно, что мощность, поглощаемая от поля веществом, пропорциональна квадрату напряженности внешнего поля, а значит, пропорциональна его мощности.

Такая связь характерна для линейной электродинамики, когда параметры среды не зависят от величины поля.

Частотная зависимость поглощаемой мощности описывается функцией

$$g(\omega) = \frac{1/(\pi\tau)}{1/\tau^2 + (\omega - \omega_{21})^2}, \qquad (1.4.26)$$

называемой кривой Лоренца, и совпадающей по виду с резонансной кривой простого колебательного контура (рис. 1.4.1).

Максимум поглощения достигается при частоте внешнего поля $\omega = \omega_{21}$. Полуширина кривой $\Delta\omega$ по уровню 0.5 равна $\Delta\omega = 1/\tau$.

Отсюда следует, что время релаксации τ можно определить экспериментально, если снять частотную зависимость поглощаемой мощности.

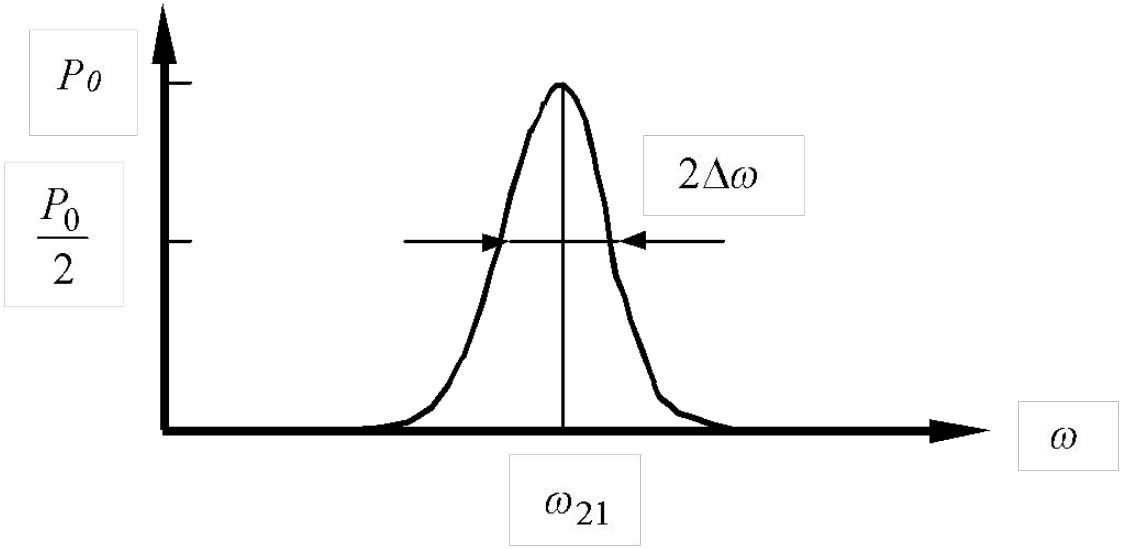

Рис.1.4.1. Частотная зависимость поглощаемой мощности.

2. Сильное поле, вероятность индуцированного перехода W сравнима с вероятностью переходов под действием термостата $1/T_1$. В этом случае из (1.4.24) и (1.4.17) получаем:

$$P = \hbar\omega_{21} N(\rho_{11}^{e} - \rho_{22}^{e}) \frac{\frac{1}{2\tau}|\Lambda|^2}{\frac{1}{\tau^2} + (\omega - \omega_{21})^2 + \frac{T_1}{\tau}|\Lambda|^2}. \qquad (1.4.27)$$

Отсюда видно, что связь между мощностями внешнего поля и поглощаемой веществом нелинейна. Когда внешнее поле очень велико ($|\Lambda|^2 \to \infty$), мощность поглощения не зависит от внешнего поля и равна:

$$P_{sat} = \hbar\omega_{21} N(\rho_{11}^{e} - \rho_{22}^{e}) \frac{1}{2T_1}. \qquad (1.4.28)$$

Величина предельной мощности поглощения определяется скоростью, с которой энергия передается термостату, $1/T_1$.

График зависимости поглощаемой мощности от мощности падающего излучения $P_{inp} \sim \left|\tilde{E}_m\right|^2 \sim \left|\Lambda\right|^2$ схематично изображен на рис. 1.4.2.

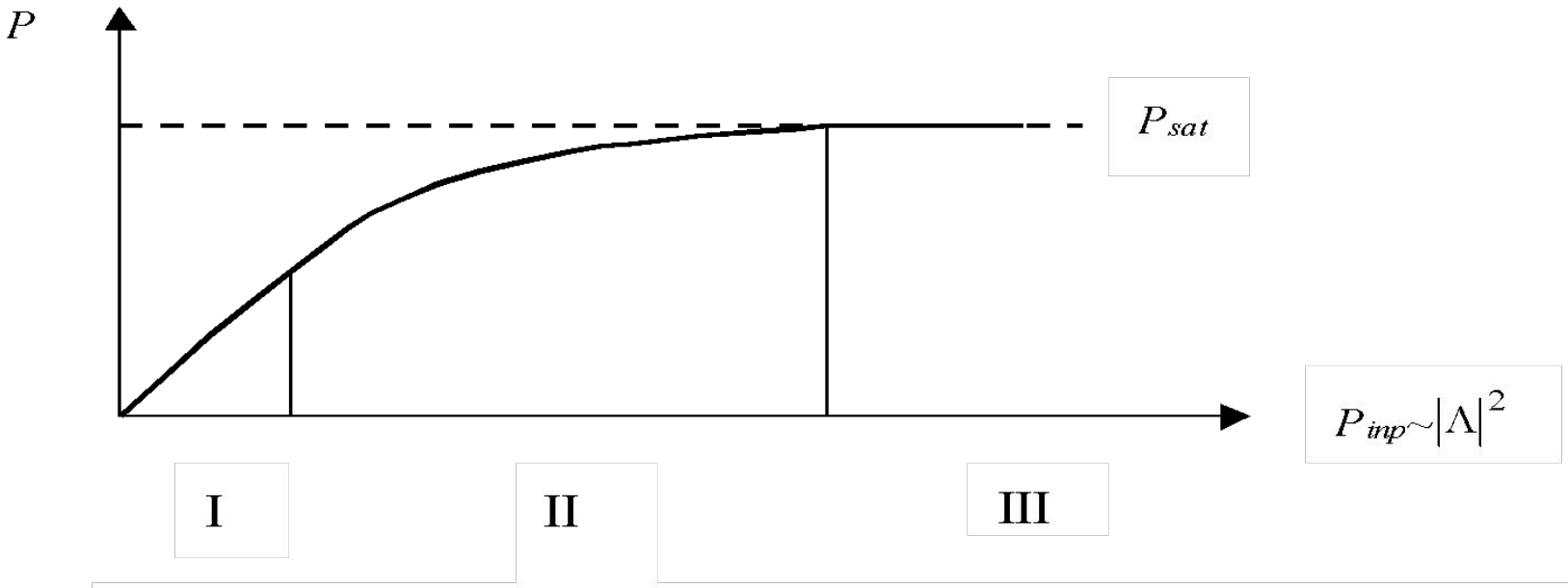

Рис. 1.4.2. Зависимость мощности, поглощаемой веществом, от входной мощности.

Область I на этом рисунке соответствует линейной электродинамике (слабое поле). В области III поглощенная веществом мощность не зависит от входной мощности. Говорят, что **вещество в этой области просветляется – почти все излучение проходит через образец**.

Нелинейность зависимости поглощаемой мощности от падающей мощности называют эффектом насыщения.

Физической причиной насыщения является выравнивание населенностей уровней, ρ_{11} и ρ_{22}, при увеличении вероятности индуцированных переходов W. Действительно, из (1.4.23) получаем:

$$\rho_{11} - \rho_{22} \cong (\rho_{11}^{e} - \rho_{22}^{e}) \frac{1}{2WT_1}, \qquad (1.4.29)$$

и видим, что разность населенностей уровней $(\rho_{11} - \rho_{22}) \to 0$ при $WT_1 \to \infty$.

1.4.4. Спонтанные переходы

В предыдущих разделах 1.4.2 и 1.4.3 учитывались только индуцированные и тепловые (безизлучательные) переходы. Кроме них, существуют спонтанные (самопроизвольные) переходы с верхнего на нижний уровень. При $E_m > E_n$ имеем:

$$A_{mn} \neq 0, A_{nm} = 0, \qquad (1.4.30)$$

где A_{mn} - вероятность спонтанного перехода одной частицы в единицу времени с m-го на n-й уровень. Следует напомнить, что при спонтанном переходе излучается поле с произвольной фазой, поляризацией и направлением распространения во всем телесном угле.

Частотная зависимость мощности спонтанного излучения определяется функцией $g(\omega) = (1/\pi\tau)/\left[1/\tau^2 + (\omega - \omega_{21})^2\right]$, где $\tau = 1/A_{21}$.

Вероятность спонтанного перехода была найдена А. Эйнштейном из анализа формулы Планка для равновесного излучения абсолютно черного тела в виде (в системе единиц СГСЕ):

$$A_{21} = \frac{8\pi\nu_{21}^3}{c^3} B, \qquad (1.4.31)$$

где $B = [(4\pi^2)/(3\hbar^2)]\left|\hat{p}_{12}\right|^2$ - коэффициент Эйнштейна и ν_{21} - частота перехода в Гц.

Отметим, что $A_{21} \sim \nu_{21}^3$. Поэтому очень велико значение спонтанных переходов для оптического диапазона.

Для безизлучательных переходов вероятность Γ_{mn} велика при $\hbar\omega_{mn} \sim kT$. Это означает, что их роль является определяющей в СВЧ-диапазоне, где $\Gamma_{mn} >> A_{mn}$, и мала в оптическом диапазоне, где $\Gamma_{mn} << A_{mn}$.

1.4.5. Балансные уравнения

Одна из задач квантовой электроники – нахождение распределения числа частиц по энергетическим уровням. Её строгое решение может быть проведено на основе общих уравнений для матрицы плотности и электромагнитного поля, когда учитывается динамика как диагональных, так и недиагональных элементов.

Существует приближенный подход, когда **используются балансные (кинетические) уравнения для числа частиц на энергетических уровнях**.

Вспомним в качестве примера уравнения для двухуровневой схемы:

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = \Gamma_{21}\rho_{22} - \Gamma_{12}\rho_{11} + W\rho_{22} - W\rho_{11}.$$

Здесь не учтены спонтанные переходы и наличие других уровней. В общем случае запишем следующее **балансное (кинетическое) уравнение**:

$$\frac{dN_m}{dt} = \sum_{n \neq m}(\Gamma_{nm}N_n - \Gamma_{mn}N_m) + \sum_{n \neq m}W_{nm}(N_n - N_m) + \sum_{n \neq m}(A_{nm}N_n - A_{mn}N_m).$$

Данная методика, основанная на уравнениях баланса, будет использоваться нами довольно часто при анализе энергетических характеристик лазеров.