

В.Н. Иванов

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВИДИМОГО КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ИНФРАКРАСНОЕ

На примере водородоподобного атома, участвующего в каком-либо колебательном процессе, рассматривается рассеяние внешнего электромагнитного излучения на основе формализма эффективных волновых функций, описывающих смешанные состояния. Показано, что дополнительный дипольный момент, обусловленный влиянием соседних атомов, приводит к возникновению в рассеянном излучении низкочастотных компонент, имеющих частоту осцилляций атома в термостате.

Основной проблемой, изучаемой в линейной и нелинейной оптике, является вопрос взаимодействия излучения с веществом. Здесь достигнуты существенные успехи, особенно в нелинейной оптике. Изучены как теоретически, так и экспериментально методы преобразования частот внешнего излучения кристаллами и молекулами. Однако исторически сложилось так, что основное внимание уделялось проблеме умножения частоты света. Проблема же уменьшения частоты излучения изучена значительно меньше. В то же время законы преобразования видимого излучения в тепловое весьма существенны, особенно в прикладном плане, так как они определяют энергетический баланс в сложных системах.

Данная работа посвящена изучению одного из возможных механизмов преобразования видимого излучения в инфракрасное ансамблем атомов или молекул.

Исходной посылкой является физически очевидное допущение о том, что кинетические степени свободы атомов (например, колебания), находящихся в молекулах и кристаллах, должны влиять на процесс рассеяния внешнего излучения, особенно, если учесть, что в общем случае у группы атомов, расположенных в узлах кристаллических решеток или в соседних молекулах, эти колебания могут оказаться синхронизованными. Эта синхронизация может происходить за счет обмена фононами (когда в среде распространяется акустическая волна) или под действием света, близкого по частоте к собственным частотам колебаний [1] (как будет показано далее, при наличии звуковой волны такое электромагнитное излучение возникает спонтанно). Изучение влияния такого рода кооперативных явлений на спектр рассеяния и составляет предмет данной работы.

Для нахождения условий генерации низкочастотных электромагнитных волн в среде необходимо решить две взаимосвязанные задачи. Во-первых, надо найти отклик одного атома на внешнее электромагнитное поле в случае, когда он участвует в некотором коллективном движении. И, во-вторых, найти условия, необходимые для генерации ансамблем таких атомов электромагнитного поля на комбинационных частотах.

В качестве объекта, на примере которого будем решать эти проблемы, возьмем ансамбль водородоподобных атомов, совершающих колебания в некотором термостате.

Такой выбор удобен по двум причинам. С одной стороны, если ориентироваться на идеологию и конечные выражения метода Хартри—Фока [2], то такая идеализация задачи довольно удачно аппроксимирует состояние реальных атомов, являющихся элементами какого-либо ансамбля. С другой стороны, выбор водородоподобного атома в качестве модели, для которой проводятся расчеты, позволяет довести математические выкладки до конечных выражений, практически не содержащих неизвестных величин, т.е. в известном смысле получить точные формулы.

Для вычисления микроскопического индуцированного дипольного момента водородоподобного атома, осциллирующего в термостате, воспользуемся волновым уравнением, записанным для усредненной по влиянию термостата вспомогательной волновой функции:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha} \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - (1-i\alpha) m \mathbf{V})^2 + \kappa \right] \Psi + e \left(\phi - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{V})/2c - (1+i\alpha) \frac{m \mathbf{V}^2}{8e} \right) \Psi, \quad (1)$$

где α и κ – положительные параметры, учитывающие ударное возмущение атома (они предполагаются эмпирическими величинами); \mathbf{V} – скорость движения этого атома в термостате; $\hat{\mathbf{P}}$ – оператор импульса; \mathbf{A} и ϕ – векторный и скалярный потенциалы; e и m – заряд и масса электрона.

Уравнение (1) построено с помощью метода интегралов по траекториям Фейнмана [3] в результате усреднения фейнмановского пропагатора по вероятности реализации случайно реализуемых траекторий. Один из вариантов способа построения этого уравнения изложен в [4].

Полная волновая функция, описывающая поведение водородоподобного атома в термостате, связана с решением уравнения (1) соотношением [5]:

$$\Psi = \Psi / \langle \Psi | \Psi \rangle^{1/2}. \quad (2)$$

То обстоятельство, что в (1) присутствуют как векторный потенциал внешнего электромагнитного поля, так и скорость дрейфа атома как целого в термостате, позволяет описывать состояние квантовой системы в случае интерференции этих двух внешних возмущающих атом факторов.

При решении волнового уравнения (1) будем учитывать, что по сравнению с электронными состояниями атомов и молекул колебания являются медленно меняющейся динамической подсистемой. Это дает возможность искать волновую функцию, удовлетворяющую (1), методом итераций, рассматривая влияние колебаний в адиабатическом приближении.

Примем некоторые допущения относительно электромагнитного поля, чей векторный потенциал фигурирует в (1).

Предположим, что поле, действующее на атом, можно представить в виде суперпозиции сильного плоскополяризованного монохроматического излучения с частотой, близкой к собственной частоте квантового перехода со второго уровня на первый (предполагается, что это излучение создает внешний источник), и достаточно слабого излучения на всех остальных частотах. Отстройка частоты ω внешнего источника излучения от собственной частоты ω_{21} квантового перехода ($\varepsilon = \omega - \omega_{21}$) удовлетворяет, очевидно, в силу сделанных допущений, условию:

$$|\varepsilon| \ll \omega. \quad (3)$$

Если перейти в (1) от векторного потенциала к напряженности электрического поля и пренебречь слагаемыми, дающими малые поправки в решение, то в дипольном приближении для водородоподобного атома можно записать

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{1+i\alpha} \left(\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 \right) \Psi - \frac{Z e^2}{r} \Psi + (\mathbf{E} \mathbf{d}) \Psi - \frac{m}{2e} (1-i\alpha) \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} d \right) \Psi - \frac{m}{8} (1+i\alpha) \mathbf{V}^2 \Psi. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{d} – дипольный момент атома; Z – кратность заряда ядра; r – длина радиуса-вектора.

Если при решении (4) воспользоваться адиабатическим приближением, то, развернув ось Z локальной системы координат, связанной с атомом, вдоль направления колебаний вектора \mathbf{E} поля внешнего источника, для вспомогательной волновой функции нетрудно найти:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = & \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\kappa}{1+i\alpha} t + \frac{i e}{\hbar c} \left(\mathbf{A} + \frac{c}{e} (1-i\alpha) \frac{m \mathbf{V}}{2} \right) \cdot \mathbf{r} \right) + \\ & + \frac{i m}{8 \hbar} (1+i\alpha) \int \mathbf{V}^2 dt (b_1(t) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (1+i\alpha) E_1 t \right) \psi_1(\mathbf{r}) + \\ & + (b_2(t) \psi_2(\mathbf{r}) + b_3(t) \psi_3(\mathbf{r})) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (1+i\alpha) E_2 t \right)). \end{aligned} \quad (5)$$

В (5) E_i – собственные значения энергии квантовых состояний водородоподобного атома; $\psi_i(\mathbf{r})$ – соответствующие собственные волновые функции, записанные [6] для атома, испыты-

вающего ударное возмущение (предполагается, что $\psi_1 = \psi_{100}$, $\psi_2 = \psi_{200}$, $\psi_3 = \psi_{210}$). Коэффициенты $b_i(t)$, фигурирующие в выражении (5), приближенно равны:

$$b_1(t) = A_1 \exp(\beta_1 t) + A_2 \exp(\beta_2 t); \quad (6)$$

$$b_3(t) = B_1 \exp(-\beta_2 t) + B_2 \exp(-\beta_1 t); \quad (7)$$

$$b_2(t) = -\frac{3 a_0 m \omega_0 V_z}{4 \hbar Z} B_1 \exp(-\beta_2 t) \left[\frac{\exp(i \omega_0 t - i f_0)}{i \omega_0 - \beta_2} + \frac{\exp(-i \omega_0 t + i f_0)}{i \omega_0 + \beta_2} \right] + B_2 \exp(-\beta_1 t) \left[\frac{\exp(i \omega_0 t - i f_0)}{i \omega_0 - \beta_1} + \frac{\exp(-i \omega_0 t + i f_0)}{i \omega_0 + \beta_1} \right] + \Gamma. \quad (8)$$

В формулах (6) – (8) введены следующие обозначения: a_0 – радиус Бора; A_i , B_i , Γ – константы, определяемые начальными условиями, причем часть из них связана между собой соотношением

$$B_i = i e |\mathbf{E}_0| a_0 2^{13/2} / (3^5 Z \hbar \beta_{2i}) \exp(i (\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})) A_i; \quad (9)$$

величины V_z , ω_0 и f_0 соответствуют амплитуде, частоте и начальной фазе низкочастотных колебаний атома в термостате (у амплитуды, в силу правил отбора, учитывается только Z -я компонента); β_i – константы, которые при предположении, что отстройка частоты ε по модулю значительно больше ширины уровней и штарковского сдвига, можно оценить по формулам:

$$\beta_1 = i \left(\varepsilon + \frac{2^{14} e^2 |\mathbf{E}_0|^2 a_0^2}{9^5 \varepsilon \hbar^2 Z^2} \right) - \left(\frac{\alpha (E_1 - E_2)}{\hbar} - \left(\frac{9}{2} \alpha + \frac{\alpha (E_1 - E_2)}{\hbar \varepsilon} \right) \frac{2^{14} e^2 |\mathbf{E}_0|^2 a_0^2}{9^5 \varepsilon \hbar^2 Z^2} \right), \quad (10)$$

$$\beta_2 = -i \frac{2^{14} e^2 |\mathbf{E}_0|^2 a_0^2}{9^5 \varepsilon \hbar^2 Z^2} - \left(\frac{9}{2} \alpha + \frac{\alpha (E_1 - E_2)}{\hbar \varepsilon} \right) \frac{2^{14} e^2 |\mathbf{E}_0|^2 a_0^2}{9^4 \varepsilon \hbar^2 Z^2}. \quad (11)$$

В (9) – (11) \mathbf{E}_0 – амплитуда внешнего поля на частоте ω ; \mathbf{K} – волновой вектор световой волны; \mathbf{R} – радиус-вектор точки, где находится центр масс атома.

Принимая во внимание записанные выражения, у дипольного момента водородоподобного атома, определяемого по формуле

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \mathbf{d} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle / \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (12)$$

в предположении длительного воздействия внешнего излучения (t значительно больше времени жизни возбужденного состояния), несложно выделить с точностью до малых большего порядка малости низкочастотную составляющую

$$\langle \tilde{\mathbf{d}}(t) \rangle = e a_0 (9 m V_z a_0 / Z^2 \hbar) \cos(\omega_0 t - f_0). \quad (13)$$

Этот индуцированный дипольный момент обусловлен интерференцией квантовых состояний, возбужденных высокочастотной световой волной.

Здесь необходимо отметить следующее: если решить в приближении медленно меняющейся огибающей [1] уравнение Максвелла для световой волны с частотой ω , распространяющейся в среде рассматриваемых нами водородоподобных атомов, то при сделанных предположениях о характере внешнего поля несложно получить, что эта волна совпадает со световой волной внешнего источника излучения.

Чтобы найти вид электромагнитной волны, имеющей частоту ω_0 , сделаем еще ряд физически очевидных допущений. Примем, что имеет место некоторая синхронизация колебаний соседних атомов. О механизме такой возможной синхронизации было сказано выше. Кроме того, учтем следующее: при решении уравнения (4) мы разделили внешние поля на сильное и слабые, что приводит к тому, что фактически в волновой функции (5) не учитывается влияние

на дипольный момент атома электромагнитных полей с частотами, отличными от ω . Это позволяет в выбранном приближении пренебрегать возможной перекачкой энергии волн с комбинационными частотами в основную несущую волну. В итоге для возбуждаемой в данной точке пространства низкочастотной составляющей поляризации справедливо следующее выражение:

$$\mathbf{P}(t) = N \langle \tilde{\mathbf{d}}(t) \rangle. \quad (14)$$

В (14) N – концентрация атомов в данной точке пространства, имеющих одинаковую фазу колебаний.

Как хорошо известно [1], в дипольном приближении на достаточном удалении от ансамбля атомов меняющееся во времени электрическое поле можно записать в виде соотношения:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) = \frac{1}{c^2 |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} \left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P} \left(t - \frac{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|}{c} \right) \times \mathbf{n} \right] \times \mathbf{n} \right\}. \quad (15)$$

В формуле (15) введены следующие обозначения: \mathbf{n} – единичный вектор в направлении наблюдения; \mathbf{r}_0 – радиус-вектор точки наблюдения; \mathbf{r}_1 – радиус-вектор точки, где расположен дипольный момент.

Для того чтобы найти суммарное волновое возмущение, создаваемое в точке наблюдения достаточно протяженным объектом, необходимо проинтегрировать (15) по объему, занимаемому ансамблем атомов.

Примем для определенности, что синхронизация колебаний атомов происходит в результате распространения в среде некоторой волны, т.е. допустим, что от точки к точке f_0 меняется по закону:

$$f_0 = \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}_1, \quad (16)$$

где \mathbf{K}_0 – волновой вектор волны синхронизации.

Допустим, кроме того, что атомы занимают объем, представляющий собой параллелепипед, распространяющийся вдоль оси x от $-l$ до l и вдоль осей z и y от $-b$ до b (причем длина этого параллелепипеда вдоль оси x значительно превосходит величину b). Тогда для электромагнитной волны, возбуждаемой на частоте ω_0 , несложно получить

$$\mathbf{E}_s(\mathbf{r}_0, t) = [\mathbf{n} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{n}]] \frac{8c}{\omega_0 |\mathbf{r}_0|} V_z N \left(\frac{9 e m a_0}{\hbar Z^2} \right) \frac{\sin(\omega_0 l n_{ox}/c)}{n_{ox}} \frac{\sin(\omega_0 b n_{oy}/c)}{n_{oy}} \frac{\sin(\omega_0 b n_{oz}/c)}{n_{oz}} \times \\ \times \cos(\omega_0 t - |\mathbf{K}_0| |\mathbf{r}_0|). \quad (17)$$

В соотношении (17) \mathbf{k} – единичный вектор вдоль оси z , а n_{0i} – величины, определяемые по формулам:

$$n_{ox} = \cos(\alpha) - (c/v_0) \cos(\alpha_1); \quad (18)$$

$$n_{oy} = \cos(\beta) - (c/v_0) \cos(\beta_1); \quad (19)$$

$$n_{oz} = \cos(\gamma) - (c/v_0) \cos(\gamma_1), \quad (20)$$

где v_0 – фазовая скорость волны синхронизации; $\cos(\alpha)$, $\cos(\beta)$ и $\cos(\gamma)$ – направляющие косинусы вектора \mathbf{n} , а $\cos(\alpha_1)$, $\cos(\beta_1)$ и $\cos(\gamma_1)$ – направляющие косинусы вектора \mathbf{K}_0 .

Как легко заметить, индуцированная электромагнитная волна на частоте ω_0 возникает при наличии волны синхронизации всегда. Причем амплитуда ее в значительной степени определяется величиной параметров n_{0i} . В случае, когда эти параметры равны нулю, амплитуда максимальна. Это условие можно трактовать как условие синхронизма для низкочастотной электромагнитной волны. Однако при $v_0 \neq c$ все три параметра одновременно равняться нулю не могут. В этом случае наиболее существенным является коэффициент n_{ox} . Отсюда следует, что при возбуждении звуковой волны в среде, содержащей водородоподобные атомы, есть

направления, в которых при наличии внешнего высокочастотного излучения инфракрасное излучение максимально.

Интересно отметить, что в случае, когда v_0 равна скорости света, условия синхронизма для всех трех параметров выполняются одновременно. Причем амплитуда волны на частоте ω_0 является максимально возможной и линейно зависит от размеров объема, занимаемого атомами.

В заключение отметим следующее. Формально в данной работе рассмотрена идеализированная задача. Однако она достаточно близка к реальным условиям, которые имеют место в экспериментах по рассеянию света. Это дает основание высказать предположение, что полученные результаты описывают один из механизмов теплового излучения освещаемых внешним источником излучения тел. Если при этом принять во внимание, что под действием низкочастотного излучения возможно возбуждение колебательных степеней свободы молекул и кристаллов, то этот механизм можно трактовать как один из каналов диссипации лучистой энергии и нагрева вещества.

1. Шен И. Р. Принципы нелинейной оптики. М.: Наука, 1989. 557 с.
2. Савельев И. В. Основы теоретической физики. Т. 2. М.: Наука, 1977. 351 с.
3. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. 382 с.
4. Иванов В. Н. // Известия вузов. Сер. Физика. 1993. Т. 36. N 3. С. 110–113.
5. Иванов В. Н. // Оптика атмосферы. 1991. Т. 4. N 1. С. 82–87.
6. Иванов В. Н. // Известия вузов. Сер. Физика. 1993. Т. 36. N 9. С. 8–11.

Омский государственный университет

Поступила в редакцию
26 апреля 1995 г.

V. N. Ivanov. Transformation of Visible Coherent Radiation to Infrared One.

A scattering of external electromagnetic radiation is considered as an example of hydrogen like atom participating in any oscillatory process on the basis of formalism of effective wave functions, which describe mixed quantum states. It is shown, that the additional dipole moment caused by next atoms influence results in occurrence of low-frequency atom oscillation in the scattered radiation.