

К. К. АЛТУНИН

ОПТИКА НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

**ЧАСТЬ 2
УРАВНЕНИЯ ДЛЯ АТОМНЫХ
ПЕРЕМЕННЫХ**



К. К. Алтунин

**ОПТИКА НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ.
ЧАСТЬ 2.
УРАВНЕНИЯ
ДЛЯ АТОМНЫХ
ПЕРЕМЕННЫХ**



Москва
2014

УДК 535.3
ББК В22.31
А52

*Печатается по решению Редакционно-издательского совета
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
профессионального образования "Ульяновский государственный
педагогический университет имени И. Н. Ульянова"*

Рецензенты:

В. А. Сергеев — профессор, д.т.н.
В. М. Журавлёв — профессор, д. ф.-м. н.
С. В. Червон — профессор, д. ф.-м. н.

Алтунин К. К.

А52 Оптика наноструктур и наноматериалов. Часть 2.
Уравнения для атомных переменных: учебное пособие.
2-е изд. / К. К. Алтунин. — М.: Директ-Медиа, 2014. —
61 с.

ISBN 978-5-4475-0323-9

Учебное пособие посвящено современным представлениям о нелокальных уравнениях электродинамики, которые могут быть применены вместо уравнений Максвелла при решении различных граничных задач оптики. Вывод нелокальных уравнений производится на основе полуклассического и квантово-электродинамического подходов. С учётом различных типов квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов получены различные нелокальные уравнения распространения электромагнитных волн в спиновых системах, в диэлектриках и в металлах. Нелокальные полевые уравнения применены для решения ряда типовых граничных задач оптики в полубесконечных средах и в малых объектах, линейные размеры которых значительно меньше длины световой волны. Особое внимание уделено оптическим ближнепольным резонансам, которые образуются в наноструктурных системах. Рассмотрены приложения полученных результатов в оптической ближнепольной микроскопии.

Учебное пособие предназначено для студентов и аспирантов физических специальностей университетов. Книга может быть также полезна исследователям и преподавателям.

УДК 535.3
ББК В22.31

© Алтунин К. К., текст, 2014
ISBN 978-5-4475-0323-9 © Издательство «Директ-Медиа», макет, оформление, 2014

Оглавление

Введение.....	5
Глава 2. Уравнения для атомных переменных в системе взаимодействующих атомов во внешнем поле оптического излучения	11
1. Двухуровневое приближение	11
2. Оптические уравнения Блоха	14
3. Система взаимодействующих двухуровневых атомов в поле оптического излучения.....	17
3.1. Усреднение по ансамблю атомов.....	21
4. Уравнения движения для атомных переменных двухатомной системы в поле излучения	23
5. Уравнения движения для атомных и полевых переменных в сверхтонкой плёнке двухуровневых атомов	29
5.1. Уравнения Блоха и интегральное полевое уравнение.....	31
5.2. Квазидвумерная пленка двухуровневых атомов.....	35
5.3. Стационарное решение модифицированных оптических уравнений Блоха	39
Приложение А.....	43

Приложение В. Математическая лемма	48
Приложение С. Уравнения для остальных переменных	54
Список литературы.....	59

Введение

Основной целью настоящей работы является представление единого теоретического подхода для решения широкого круга задач, встречающихся в оптике наноструктурных систем. В настоящей работе будет показано, что адекватность этого теоретического подхода подтверждается прецизионными экспериментами. В настоящей работе дан строгий вывод основных уравнений, на основе которых решены различные граничные задачи оптики наноструктурных систем. При этом конечные формулы имеют ясный физический смысл и могут быть рекомендованы для теоретического расчёта различных приборов и устройств на основе наноструктурных систем.

Конструирование любого оптического прибора или устройства основано на формулах Френеля, которые связывают между собой амплитуды внешней, отражённой и преломлённой волн. Поражает воображение точность этих формул, которая подтверждается многими прецизионными экспериментами и нарушаются эти формулы лишь в небольшой окрестности угла Брюстера θ_B , определяемого из равенства $\operatorname{tg} \theta_B = n$, где n — показатель преломления оптической среды. Для объяснения этого расхождения с формулами Френеля в настоящей работе представлена микроскопическая теория переходного слоя на поверхности изотропного непоглощающего диэлектрика. Эта теория позволяет объяснить многочисленные прецизионные эксперименты по брюстеровскому отражению света, и основана эта теория на решении нелокальных уравнений электродинамики, представленных в настоящей работе.

Таким образом, на решении оптической задачи был апробирован представленный в настоящей работе теоретический подход, что позволяет применять его для решения и других оптических задач. К таким задачам, безусловно, можно отнести граничные задачи оптики, в которых учитывается влияние дискретного распределения атомов и наночастиц на границе раздела двух сред и в слоистых средах. Решению такого рода задач и посвящена настоящая работа.

Среди многообразия известных в настоящее время наноструктурных систем особое место занимают двухатомные объекты, например, димеры на поверхности твёрдых тел, атом-зонд вблизи атома образца и т.д. Взаимодействие атомов при межатомных расстояниях порядка 1 нм во внешнем поле излучения необходимо исследовать без теории возмущений, учитывая большие внутренние поля, которые могут значительно превышать внешние поля, а также выделяя определённый тип квантовых переходов с соответствующими квантовыми правилами отбора. Глубокое исследование двухатомных наноструктурных объектов в значительной степени определяет понимание оптических свойств многоатомных наноструктурных объектов. В системе двух взаимодействующих дипольных осцилляторов во внешнем поле оптического излучения возникают два или четыре оптических размерных резонанса в зависимости от того, являются ли дипольные осцилляторы одинаковыми или разными, а также в зависимости от поляризации внешнего излучения по отношению к оси наноструктурного двухатомного объекта.

Частоты оптических размерных резонансов сильно зависят от межатомного расстояния. При этом на малых, порядка 1 нм, расстояниях частоты оптических размерных резонансов отличаются от собственных частот дипольных осцилляторов на величину, значительно (примерно в 10^5 раз) превышающую времена затухания осцилляторов. При больших межатомных расстояниях, сравнимых с длиной волны внешнего оптического излучения, частоты оптических размерных резонансов отличаются от собственных частот осцилляторов на величину порядка времени затухания осцилляторов. Взаимодействие двухатомного наноструктурного объекта с внешним оптическим излучением характеризуется диагональным тензором эффективной поляризуемости, который отличается от классической поляризуемости изолированных атомов, составляющих наноструктурный объект, как по величине, так и зависимостью от частоты. Оптические размерные резонансы образуются и в трёхатомных наноструктурных объектах. По-видимому, такие резонансы должны проявляться в различных наноструктурных объектах, состоящих из небольшого числа атомов, где влиянием статистического усреднения индуцированных дипольных моментов атомов можно пренебречь.

Свойства оптических размерных резонансов будут рассмотрены в квантовых наноструктурных объектах на примере двухатомных систем. Будет показано, что оптические размерные резонансы в таких системах могут сильно зависеть от вероятности обнаружения атомов в возбуждённых состояниях.

При учёте насыщения квантовых переходов в наноструктурных объектах проявляются нелинейные оптические размерные резонансы. Можно сформулировать условие применимости линейного приближения, когда ролью насыщения квантовых переходов можно пренебречь и оптические размерные резонансы являются линейными. При этом смещение частот оптических размерных резонансов по отношению к частоте перехода в спектре взаимодействующих атомов определяется в случае одинаковых атомов характерной частотой резонансной передачи энергии между атомами, которая определяет расщепление энергии симметричного и антисимметричного состояний взаимодействующих атомов.

Будет рассмотрено в настоящей работе ближнепольное взаимодействие нанопара с поверхностью твёрдого тела при наличии на поверхности инородных тел, например, островковых плёнок для объяснения экспериментов по ближнепольной оптической микроскопии. В частности, будет проанализирована задача взаимодействия нанопара, активированного примесными атомами, с полубесконечным диэлектриком. В настоящей работе будет рассмотрена задача о взаимодействии двух нанопар, и будет показано, что в таком наноструктурном объекте возникают ближнепольные оптические резонансы, обусловленные как кулоновским, так и запаздывающим взаимодействием атомов внутри нанопар, так и взаимодействием атомов, принадлежащих разным нанопарам.

В последнее время большое внимание уделяется так называемым метаструктурным системам, состоящим из наноструктурных объектов.

Примером такой системы может являться система примерно из 10^3 активированных наночастиц, которую предлагается использовать для оптического квантового компьютера. В настоящей работе будут рассмотрены некоторые метаструктурные системы из наночастиц. Мы покажем, что такие системы обладают уникальными оптическими свойствами при отражении и преломлении света.

Важное значение в оптике наноструктур имеет эффект оптического просветления наноструктурного слоя и границы раздела двух сред. Как будет показано в настоящей работе, изменение структуры монослоя наночастиц приводит к кардинальному изменению отражения света от границы раздела двух сред в широком диапазоне длин волн. Граница раздела может превращаться либо в идеальное зеркало, либо становиться абсолютно прозрачной, когда отражательная способность границы меняется от нуля до единицы при соответствующей структуре слоя наночастиц. Получено условие идеального оптического просветления, при выполнении которого монослой наночастиц представляет собой идеальное просветляющее покрытие, позволяющее снизить до нуля отражательную способность границы полубесконечной (поглощающей или непоглощающей) оптической среды во всём видимом диапазоне длин волн.

При этом в слое наночастиц возбуждаются световые волны, распространяющиеся вдоль слоя, а пропускательная способность границы раздела двух сред становится больше единицы.

Выведены формулы для амплитуд отражённой и прошедшей волн, а также для амплитуды световой волны в наноструктурном слое, которые в предельном случае отсутствия слоя переходят в известные формулы Френеля. На основе полученных формул, как показано в настоящей работе, можно конструировать различные оптические приборы и устройства. Некоторые из возможных приложений этих формул и эффекта оптического просветления подробно рассмотрены в настоящей работе. Одно из важных применений эффекта оптического просветления связано с реализацией технологии невидимости непрозрачных тел в результате обтекания тел световыми волнами.

Будем придерживаться схемы изложения, в которой вначале выводятся полевые и материальные уравнения для описания наноструктурных систем. Далее будут представлены решения некоторых граничных задач оптики, а затем будут рассмотрены некоторые приложения полученных решений.

Глава 2.

Уравнения для атомных переменных в системе взаимодействующих атомов во внешнем поле оптического излучения

1. Двухуровневое приближение

Двухуровневое приближение лучше всего реализовать, если рассматривать квантовый переход атома из основного в первое возбуждённое состояние, когда частота внешнего оптического поля близка к частоте перехода. Пусть W_0 и W_1 — энергии основного и первого возбужденного состояний атомов и частота квантового перехода $\omega_0 = (W_1 - W_0)/\hbar \approx \omega$, где ω — частота внешнего оптического поля. В электрическом дипольном приближении оператор Гамильтона изолированного атома, взаимодействующего с внешним полем, согласно оператору (1.5.1), рассмотренному в первой части настоящего учебного пособия имеет вид:

$$H = H_0 - \mathbf{d}\mathbf{E}_I(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

где H_0 — оператор Гамильтона атома в отсутствие оптического поля, $\mathbf{d}$ — оператор дипольного момента атома, $\mathbf{E}_I$ — оператор напряжённости электрического поля внешней волны в точке наблюдения $\mathbf{r}$, где находится двухуровневый атом. При этом матрица оператора H_0 , определённая с помощью собственных функций этого оператора $|0\rangle$ и $|1\rangle$, является, очевидно, диагональной, а матрица оператора $\mathbf{d}$ является недиагональной.

Матричные элементы оператора $\mathbf{d}$ являются, в общем случае, комплексными величинами. Представим матрицу этого оператора для двухуровневого атома следующим образом:

$$\mathbf{d}_{mn} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d}'_0 + i\mathbf{d}''_0 \\ \mathbf{d}'_0 - i\mathbf{d}''_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

где $\mathbf{d}'_0$ и $\mathbf{d}''_0$ — действительные величины. Произвольный оператор двухуровневого атома может быть представлен в виде суперпозиции матриц Паули $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ и единичного оператора $\hat{I}$ [24], поэтому оператор дипольного момента $\mathbf{d}$, в соответствии с видом матрицы (1.2), имеет вид:

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}'_0 \sigma_1 - \mathbf{d}''_0 \sigma_2, \quad (1.3)$$

а оператор H_A представляется как

$$H_A = \frac{1}{2}(W_1 + W_0)\hat{I} + \frac{1}{2}(W_1 - W_0)\sigma_3. \quad (1.4)$$

При этом матрицы Паули $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, как известно, имеют вид:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Собственные функции оператора σ_3 , соответствующие собственным значениям $\pm 1/2$, равны

$$\chi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Поэтому матрица оператора (1.4) имеет вид:

$$(H_A)_{mn} = \begin{pmatrix} W_1 & 0 \\ 0 & W_0 \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

а волновые функции основного состояния $|0\rangle$ и возбужденного состояния $|1\rangle$ в представлении матриц (1.5) выражаются как

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

Базисные функции (1.8) позволяют представить волновую функцию двухуровневого атома в переменном поле как

$$\Psi = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (1.9)$$

где комплексные коэффициенты квантовой суперпозиции a и b зависят от времени и удовлетворяют условию нормирования: $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Волновая функция (1.9) двухуровневого атома позволяет вычислить средние значения физических величин, именно:

$$\begin{aligned} S_1 &= \langle \Psi | \sigma_1 | \Psi \rangle = ab^* + a^*b, \\ S_2 &= \langle \Psi | \sigma_2 | \Psi \rangle = -i(ab^* - a^*b), \\ S_3 &= \langle \Psi | \sigma_3 | \Psi \rangle = |b|^2 - |a|^2. \end{aligned} \quad (1.10)$$

При этом выполняется закон сохранения: $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = 1$.

Физический смысл средних значений (1.10) заключается в следующем: величину $(1/2)\hbar\omega_0 S_3$ можно интерпретировать как внутреннюю энергию двухуровневого атома, отсчитанную от средней энергии $(1/2)(W_0 + W_1)$. Будем называть величину S_3 инверсией. Величины S_1 и S_2 определяют, согласно оператору (1.3), квантовомеханическое среднее значение индуцированного момента атома.

2. Оптические уравнения Блоха

Определим средние значения (1.10) с помощью уравнений движения операторов σ_1, σ_2 и σ_3 в представлении Гейзенберга. В этом представлении любой оператор $\mathbf{F}$, не зависящий явно от времени, подчиняется следующему уравнению:

$$i\hbar\dot{\mathbf{F}} = [\mathbf{F}, \mathbf{H}], \quad (2.1)$$

где коммутатор $[\mathbf{F}, \mathbf{H}] = \mathbf{F}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{F}$.

Тогда, учитывая перестановочные соотношения операторов (1.5) и явный вид оператора $\mathbf{H}$, получим следующие операторные уравнения:

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_1 &= -\omega_0 \sigma_2 + \frac{2}{\hbar} (\mathbf{d}_0'' \mathbf{E}_I) \sigma_3, \\ \dot{\sigma}_2 &= \omega_0 \sigma_1 + \frac{2}{\hbar} (\mathbf{d}_0' \mathbf{E}_I) \sigma_3, \\ \dot{\sigma}_3 &= -\frac{2}{\hbar} (\mathbf{d}_0'' \mathbf{E}_I) \sigma_1 - \frac{2}{\hbar} (\mathbf{d}_0' \mathbf{E}_I) \sigma_2.\end{aligned}\tag{2.2}$$

От операторных уравнений (2.2) можно перейти к уравнениям для средних значений S_1 , S_2 и S_3 , учитывая то, что в представлении Гейзенберга волновые функции атома от времени не зависят. Более того, предположим, что атом взаимодействует с классическим внешним полем и величина $\mathbf{E}_I$ в уравнениях (2.2) не является оператором и представляется следующей функцией:

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0I} e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} e^{-i\omega t} + \text{к.с.}, \tag{2.3}$$

где $\mathbf{k}_0$ — волновой вектор внешнего оптического излучения, $\mathbf{E}_{0I} = \mathbf{e}_I E_{0I}$, E_{0I} — действительная амплитуда волны, $\mathbf{e}_I$ — единичный вектор поляризации волны, ω — частота внешнего излучения. Тогда вид уравнений для переменных S_1 , S_2 и S_3 совпадает с уравнениями (2.2).

Введем преобразование от переменных S_1, S_2, S_3 к переменным u, v, w , имеющее вид:

$$S_1 = u \cos \omega t - v \sin \omega t, \quad S_2 = u \sin \omega t + v \cos \omega t, \quad S_3 = w \quad (2.4)$$

Подставим соотношения (2.4) в полученные уравнения для S_1, S_2, S_3 , учитывая то, что $\mathbf{d}_0'' = 0$ и $(2/\hbar)(\mathbf{d}_0' \mathbf{E}_{0I}) \equiv \kappa E_{0I}$ в точке $\mathbf{r} = 0$. Тогда получим следующие уравнения для переменных u, v, w :

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -(\omega_0 - \omega)v, \\ \dot{v} &= (\omega_0 - \omega)u + \kappa E_{0I} w, \\ \dot{w} &= -\kappa E_{0I} v. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Эти уравнения известны как оптические уравнения Блоха [24]. Они позволяют исследовать взаимодействие изолированного атома с полем внешней оптической волны в течение интервалов времени, значительно меньших времен фазовой T_2' и энергетической T_1 релаксации. Можно ввести феноменологическим образом эти времена релаксации в уравнения (2.5), что приведёт нас к следующим уравнениям движения [24]:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -\Delta v - u/T_2', \\ \dot{v} &= \Delta u + \kappa E_{0I} w - v/T_2', \\ \dot{w} &= -\kappa E_{0I} v - \frac{w - w_0}{T_1}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где $\Delta = \omega_0 - \omega$ — отстройка от резонанса, w_0 — равновесное значение инверсии, равное -1 . Уравнения (2.6) позволяют рассматривать взаимодействие изолированного двухуровневого атома с внешним

полем в течение произвольных интервалов времени. В частном случае малоинтенсивных полей, когда инверсия атома мало отличается от равновесного значения, уравнения (2.6) переходят в уравнения движения для переменных u и v линейного дипольного осциллятора [24]:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -\Delta v - u/T'_2, \\ \dot{v} &= \Delta u - \kappa E_{0I} - v/T'_2,\end{aligned}\tag{2.7}$$

где $\kappa \equiv e/m\omega x_0$, e , m — заряд и масса электрона, x_0 — постоянная амплитуда колебаний атомного электрона.

3. Система взаимодействующих двухуровневых атомов в поле оптического излучения

Уравнения (2.6), (2.7) не содержат межатомное взаимодействие, которое должно заменять внешнее поле на действующие поля в местах расположения атомов в системе. Рассмотрим уравнения движения для атомных переменных, учитывая межатомное взаимодействие. Для этого вместо переменных u_k, v_k, w_k k -ых двухуровневых атомов N -атомной системы будем использовать элементы матрицы плотности $\rho_{ij}^{(k)}$ $i, j = 1, 2$, $k = 1, 2, \dots, N$ двухуровневых атомов, которые связаны с переменными u_k, v_k, w_k :

$$\rho_{21}^{(k)} = (u_k - iv_k)e^{-i\omega t}, \quad \rho_{22}^{(k)} - \rho_{11}^{(k)} = w_k, \quad \rho_{12}^{(k)} = \rho_{21}^{(k)*}.$$

(3.1)

Следуя одноатомному формализму, представленному в [35], запишем систему дифференциальных уравнений для элементов матрицы плотности k -го двухуровневого атома как

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{11}^{(k)} &= -\frac{i}{\hbar}(\mathbf{d}'_0 \mathbf{E}_k)(\rho_{12}^{(k)} - \rho_{21}^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{22}^{(k)} &= \frac{i}{\hbar}(\mathbf{d}'_0 \mathbf{E}_k)(\rho_{12}^{(k)} - \rho_{21}^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{21}^{(k)} &= -i\omega_0 \rho_{21}^{(k)} + \frac{i}{\hbar}(\mathbf{d}'_0 \mathbf{E}_k)(\rho_{11}^{(k)} - \rho_{22}^{(k)}),\end{aligned}\tag{3.2}$$

где $\mathbf{d}'_0$ — действительная часть дипольного момента перехода атома, одинаковая для всех атомов системы, $\mathbf{E}_k$ — действующее поле в месте расположения k -го атома системы,

$$\mathbf{E}_k = \mathbf{E}_I^{(k)} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \mathbf{E}_{lk}, \tag{3.3}$$

где $\mathbf{E}_I^{(k)}$ — напряжённость электрического поля внешней волны в месте расположения k -го атома. В работе [35] предполагается, что N -атомная система представляет собой линейную цепочку, а внешняя волна является плоской волной с волновым вектором $\mathbf{k}_0$, перпендикулярным оси атомной цепочки, поэтому $\mathbf{E}_I^{(k)}(t) = \mathbf{E}_I(t)$ для всех индексов k . Поле $\mathbf{E}_{lk}$ образовано индуцированным дипольным моментом l -го атома в цепочке,

$$\mathbf{d}_l(t) = \mathbf{d}'_0 [\rho_{12}^{(l)}(t) + \rho_{21}^{(l)}(t)], \tag{3.4}$$

поэтому в месте расположения k -го атома имеем следующее выражение поля электрического диполя:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{lk}(t) = \text{rot rot} \frac{\mathbf{d}_l(t')}{r_{lk}} = & \left[\frac{3d_l(t')}{r_{lk}^5} + \frac{3\dot{d}_l(t')}{cr_{lk}^4} + \frac{\ddot{d}_l(t')}{c^2 r_{lk}^3} \right] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_{lk}) \mathbf{r}_{lk} - \\ & - \left[\frac{d_l(t')}{r_{lk}^3} + \frac{\dot{d}_l(t')}{cr_{lk}^2} + \frac{\ddot{d}_l(t')}{c^2 r_{lk}} \right] \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где $t' = t - r_{lk}/c$, r_{lk} — расстояние между l -м и k -м атомом в системе, $\mathbf{n} = \mathbf{d}'_0 / |\mathbf{d}'_0|$, $\mathbf{r}_{lk} = (l - k)\mathbf{a}$, $\mathbf{a}$ — вектор решётки.

Решение уравнений (3.3) может быть получено в приближении вращающейся волны, представляя зависящие от времени функции следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho_{21}^{(k)} &= \frac{1}{2} R_k(t) e^{-i\omega t}, & \mathbf{E}_I(t) &= \frac{1}{2} \mathbf{E}_{0I}(t) e^{-i\omega t} + \text{к.с.}, \\ \mathbf{E}_{lk}(t) &= \frac{1}{2} \mathbf{E}_{lk}^{(0)}(t) e^{-i\omega t} + \text{к.с.}, & \mathbf{E}_k(t) &= \frac{1}{2} \mathbf{E}_k^{(0)}(t) e^{-i\omega t} + \text{к.с.}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

где величины $\mathbf{E}_{lk}^{(0)}$ и $\mathbf{E}_k^{(0)}$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{lk}^{(0)}(t) &= \left\{ \left[\frac{3}{r_{lk}^5} - \frac{3ik_0}{r_{lk}^4} - \frac{k_0^2}{r_{lk}^3} \right] (\mathbf{d}'_0 \mathbf{r}_{lk}) \mathbf{r}_{lk} - \left[\frac{1}{r_{lk}^3} - \frac{ik_0}{r_{lk}^2} - \frac{k_0^2}{r_{lk}} \right] \mathbf{d}'_0 \right\} R_l(t') e^{ik_0 r_{lk}}, \\ \mathbf{E}_k(t) &= \mathbf{E}_{0I}(t) + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \mathbf{E}_{lk}^{(0)}(t). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Учитывая то, что в атомной цепочке конечных размеров величины $R_l(t')$ мало изменяются за время r_{lk}/c , пренебрежём запаздыванием в этих величинах

нах. Подставим выражения (3.6) в уравнения (3.2). Тогда получим следующую систему уравнений для медленно изменяющихся со временем амплитуд:

$$\begin{aligned}\dot{R}_k &= -i\Delta R_k + i \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N (\Delta_{lk} - i\gamma_{lk}) R_l w_k - i\Omega w_k, \\ \dot{w}_k &= \frac{i}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \Delta_{lk} (R_k R_l^* - R_k^* R_l) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \gamma_{lk} (R_k R_l^* + R_k^* R_l) + i \frac{\Omega}{2} (R_k^* - R_k),\end{aligned}\quad (3.8)$$

где $\Delta = \omega_0 - \omega$ — отстройка от резонанса, $\Omega = d'_0 E_{0I} / \hbar$ — частота Раби внешнего поля и матрицы Δ_{lk} и γ_{lk} определяется формулами:

$$\begin{aligned}\Delta_{lk} &= \frac{(d'_0)^2}{\hbar a^3} \left\{ \left[\frac{\cos(k_0 a |l-k|)}{|l-k|^3} + k_0 a \frac{\sin(k_0 a |l-k|)}{|l-k|^2} \right] (1 - 3 \cos^2 \theta) - \right. \\ &\quad \left. - (k_0 a)^2 \frac{\cos(k_0 a |l-k|)}{|l-k|} \sin^2 \theta \right\},\end{aligned}\quad (3.9)$$

$$\begin{aligned}\gamma_{lk} &= \frac{(d'_0)^2}{\hbar a^3} \left\{ \left[k_0 a \frac{\cos(k_0 a |l-k|)}{|l-k|^2} - \frac{\sin(k_0 a |l-k|)}{|l-k|^3} \right] (1 - 3 \cos^2 \theta) + \right. \\ &\quad \left. + (k_0 a)^2 \frac{\sin(k_0 a |l-k|)}{|l-k|} \sin^2 \theta \right\},\end{aligned}\quad (3.10)$$

где θ — угол между вектором $\mathbf{d}'_0$ и осью линейной цепочки.

В частном случае, когда длина цепочки атомов значительно меньше длины волны λ внешнего опти-

ческого излучения, то есть $L = Na \ll \lambda$, матрицы Δ_{lk} и γ_{lk} приобретают следующий вид:

$$\Delta_{lk} = \frac{(d'_0)^2}{\hbar r_{lk}^3} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad \gamma_{lk} = \frac{2(d'_0)^2 k_0^3}{3\hbar} = \frac{1}{2} \gamma_0,$$

где γ_0 — радиационная постоянная изолированного атома.

В уравнениях (3.8) содержится N интегралов движения,

$$|R_k|^2 + w_k^2 = \text{const}. \quad (3.12)$$

Учитывая то, что равновесное состояние атомов системы определяется значениями $R_k = 0$, $w_k = -1$, получим, что интегралы движения (3.12) равны единице.

3.1. Усреднение по ансамблю атомов

Уравнения (3.8), определяющие элементы матрицы плотности двухуровневых атомов системы, позволяют вычислить квантовомеханические средние индуцированных дипольных моментов атомов и вероятности обнаружения их в основном и возбужденном состояниях. Наряду с этим усреднением при $N \gg 1$ необходимо также использовать и другие виды усреднения физических величин, например, усреднение по ансамблю атомов, когда вместо величин R_k, w_k вводятся усреднённые по ансамблю величины R и w , одинаковые для всех атомов системы.

Тогда система уравнений (3.8) после такого усреднения примет следующий вид:

$$\begin{aligned}\dot{R} &= [-i(\Delta - \Delta_L w) + \gamma_R w]R - i\Omega w, \\ \dot{w} &= -\gamma_R |R|^2 + i\frac{\Omega}{2}(R^* - R),\end{aligned}\quad (3.13)$$

где

$$\begin{aligned}\Delta_L &= \frac{3\gamma_0}{2(k_0 a)^3} \sum_{l=1}^{N/2} \left\{ \left[\frac{\cos(k_0 a l)}{l^3} + k_0 a \frac{\sin(k_0 a l)}{l^2} \right] (1 - 3\cos^2 \theta) - \right. \\ &\quad \left. - (k_0 a)^3 \frac{\cos(k_0 a l)}{l} \sin^2 \theta \right\},\end{aligned}\quad (3.14)$$

$$\begin{aligned}\gamma_R &= \frac{3\gamma_0}{2(k_0 a)^3} \sum_{l=1}^{N/2} \left\{ \left[k_0 a \frac{\cos(k_0 a l)}{l^2} - \frac{\sin(k_0 a l)}{l^3} \right] (1 - 3\cos^2 \theta) + \right. \\ &\quad \left. + (k_0 a)^2 \frac{\sin(k_0 a l)}{l} \sin^2 \theta \right\}.\end{aligned}\quad (3.15)$$

В реальном случае большой плотности и большого числа атомов в системе, когда $k_0 a \ll 1$ и $N \gg 1$, суммирование в формулах (3.14) и (3.15) даёт следующие выражения [35]:

$$\Delta_L = \frac{3\gamma_0}{2(k_0 a)^2} \zeta(3) (1 - 3\cos^2 \theta), \quad (3.16)$$

$$\gamma_R = \begin{cases} \frac{3\pi\gamma_0}{8(k_0 a)} \sin^2 \theta & \text{при } k_0 L \gg 1, \\ \frac{\gamma_0}{2} N & \text{при } k_0 L \ll 1, \end{cases} \quad (3.17)$$

где $\zeta(3) = 1,202$.

4. Уравнения движения для атомных переменных двухатомной системы в поле излучения

Уравнения (3.8), (3.13) содержат усреднённое по направлениям дипольных моментов и усреднённое по ансамблю атомов, что справедливо при рассмотрении N -атомных систем, содержащих большое число атомов. Однако представляют интерес системы из небольшого числа атомов, где не вводится какое-либо усреднение физических величин, кроме квантовомеханического усреднения [36].

Рассмотрим оптические свойства квантовой системы, состоящей из двух атомов в поле излучения. Оператор Гамильтона этой системы имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \sum_{j=1}^2 \omega_{0j} \sigma_{3j} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \sigma_{+j} (\mathbf{d}'_{0j} + i \mathbf{d}''_{0j}) \mathbf{E}_j - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \sigma_{-j} (\mathbf{d}'_{0j} - i \mathbf{d}''_{0j}) \mathbf{E}_j, \quad (4.1)$$

где $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2$ — напряжённости электрического поля в месте расположения атомов 1 и 2, ω_{01}, ω_{02} — частоты переходов атомов, операторы дипольных моментов атомов

$$\mathbf{d}_j = \frac{1}{2} \sigma_{+j} (\mathbf{d}'_{0j} + i \mathbf{d}''_{0j}) + \frac{1}{2} \sigma_{-j} (\mathbf{d}'_{0j} - i \mathbf{d}''_{0j}) \quad (4.2)$$

определяются с помощью действительных $\mathbf{d}'_{0j}$ и мнимых $\mathbf{d}''_{0j}$ частей дипольных моментов перехода атомов 1 и 2, $\sigma_{\pm j} = \sigma_{1j} \pm i \sigma_{2j}$, $\sigma_{\alpha j}$ — операторы эффективного спина j -го атома ($\alpha = 1, 2, 3; j = 1, 2$).

При этом

$$\begin{aligned} [\sigma_{1j}, \sigma_{2k}] &= 2i\sigma_{3j}\delta_{jk}, & [\sigma_{2j}, \sigma_{3k}] &= 2i\sigma_{1j}\delta_{jk}, \\ [\sigma_{3j}, \sigma_{1k}] &= 2i\sigma_{2j}\delta_{jk}, & [\sigma_{+j}, \sigma_{-k}] &= 4\sigma_{3j}\delta_{jk}, \\ [\sigma_{+j}, \sigma_{3k}] &= -2\sigma_{+j}\delta_{jk}, & [\sigma_{-j}, \sigma_{3k}] &= 2\sigma_{-j}\delta_{jk}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

где δ_{jk} — символ Кронекера.

Выведем гейзенберговские уравнения движения с помощью перестановочных соотношений (4.3) и оператора Гамильтона (4.1) для следующих операторов:

$$\mathbf{d}_{+j} = \sigma_{+j}(\mathbf{d}'_{0j} + i\mathbf{d}''_{0j}), \quad \mathbf{d}_{-j} = \sigma_{-j}(\mathbf{d}'_{0j} - i\mathbf{d}''_{0j}) \quad (4.4)$$

После соответствующих вычислений получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{d}}_{+j} &= i\mathbf{d}_{+j}\omega_{0j} + \frac{2i}{\hbar}(\mathbf{d}'_{0j} + i\mathbf{d}''_{0j})\sigma_{3j}((\mathbf{d}'_{0j} - i\mathbf{d}''_{0j})\mathbf{E}_j), \\ \dot{\mathbf{d}}_{-j} &= -i\mathbf{d}_{-j}\omega_{0j} - \frac{2i}{\hbar}(\mathbf{d}'_{0j} - i\mathbf{d}''_{0j})\sigma_{3j}((\mathbf{d}'_{0j} + i\mathbf{d}''_{0j})\mathbf{E}_j), \\ \dot{\sigma}_{3j} &= \frac{i}{\hbar}\mathbf{d}_{+j}\mathbf{E}_j - \frac{i}{\hbar}\mathbf{d}_{-j}\mathbf{E}_j. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Представим поле, действующее на атомы рассматриваемой квантовой системы, следующим образом:

$$\mathbf{E}_j = \mathbf{E}_{0j} e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{E}_{0j} = \mathbf{E}'_{0j} - i\mathbf{E}''_{0j}, \quad (4.6)$$

где $\mathbf{E}'_{0j}$ и $\mathbf{E}''_{0j}$ — действительные и мнимые части поля в месте расположения j -го атома. Переход к средним значениям в уравнениях (4.5) происходит стандартным образом, если величины $\mathbf{E}_j$ не являются операторами. Для классических полей вид уравнений (4.5) не меняется после перехода к соответствующим средним значениям. Вводя преобразования

$$\begin{aligned} \sigma_{1j} &= u_j \cos \omega t - v_j \sin \omega t, \quad \sigma_{2j} = u_j \sin \omega t + v_j \cos \omega t, \quad \sigma_3 = w_j, \\ \sigma_{\pm j} &= (u_j \pm iv_j) e^{\pm i\omega t}, \quad \mathbf{d}_{\pm j} = (\mathbf{d}'_{0j} \pm i\mathbf{d}''_{0j}) (u_j \pm iv_j) e^{\pm i\omega t} \end{aligned} \quad (4.7)$$

и обозначения

$$(u_j + iv_j) \mathbf{d}^*_{0j} = \mathbf{X}^*_j, \quad (u_j - iv_j) \mathbf{d}_{0j} = \mathbf{X}_j, \quad \mathbf{d}_{0j} = \mathbf{d}'_{0j} - i\mathbf{d}''_{0j},$$

получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{X}}_j &= -i\mathbf{X}_j (\omega_{0j} - \omega) - \frac{2i}{\hbar} w_j |\mathbf{d}_{0j}|^2 \mathbf{E}_{0j}, \\ \dot{\mathbf{X}}^*_j &= i\mathbf{X}^*_j (\omega_{0j} - \omega) + \frac{2i}{\hbar} w_j |\mathbf{d}_{0j}|^2 \mathbf{E}^*_{0j}, \\ \dot{w}_j &= \frac{i}{\hbar} \mathbf{X}^*_j \mathbf{E}_{0j} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{X}_j \mathbf{E}^*_{0j}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

где учтено, что

$$\mathbf{d}_{0j}(\mathbf{d}_{0j}^* \mathbf{E}_{0j}) = |\mathbf{d}_{0j}|^2 \mathbf{E}_{0j}. \quad (4.9a)$$

Доказательство этого равенства проведено при условии, что $\mathbf{d}_{0j} \parallel \mathbf{E}_{0j}$.

Переход к уравнениям (4.9) от уравнений (4.5) соответствует переходу во вращающуюся систему координат, известную в резонансной оптической спектроскопии [1]. Уравнения (4.9) подчиняются следующим законам сохранения:

$$\frac{d}{dt} \left(|\mathbf{X}_j|^2 + w_j^2 |\mathbf{d}_{0j}|^2 \right) = 0, \quad (4.10)$$

откуда следует, что

$$u_j^2 + v_j^2 + w_j^2 = 1. \quad (4.11)$$

Действующие поля в уравнениях (4.9), как будет показано ниже, представляются в виде суммы внешних и внутренних полей, при этом внутренние поля определяются с помощью переменных $\mathbf{X}_j$, которые, в свою очередь, зависят от действующих полей и инверсии атомов. Уравнения (4.9) будем называть уравнениями для связанных квантовых диполей, где учтена комплексность полей и направления дипольных моментов. Это позволит нам, как будет показано ниже, описать взаимное влияние диполей в двух-атомной квантовой системе.

Уравнения (4.9) следует, в общем случае, дополнить релаксационными членами, вводя феноменологически времена фазовой T_{2j}' и энергетической T_{1j} релаксации j -ых атомов системы.

Тогда вместо уравнений (4.9) получим следующие уравнения [36]:

$$\dot{\mathbf{X}}_j = -i\mathbf{X}_j\Delta_j - \frac{2i}{\hbar}w_j|\mathbf{d}_{0j}|^2\mathbf{E}_{0j} - \frac{\mathbf{X}_j}{T'_{2j}}, \quad (4.12a)$$

$$\dot{\mathbf{X}}_j^* = i\mathbf{X}_j^*\Delta_j + \frac{2i}{\hbar}w_j|\mathbf{d}_{0j}|^2\mathbf{E}_{0j}^* - \frac{\mathbf{X}_j^*}{T'_{2j}}, \quad (4.12b)$$

$$\dot{w}_j = \frac{i}{\hbar}\mathbf{X}_j^*\mathbf{E}_{0j} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{X}_j\mathbf{E}_{0j}^* - \frac{w_j - w_{0j}}{T_{1j}}, \quad (4.12c)$$

где $\Delta_j = \omega_{0j} - \omega$ — отстройка от резонанса j -го атома, w_{0j} — равновесное значение инверсии j -го атома.

Напряжённость электрического поля E_j в (4.9), (4.12) подчиняется уравнению

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=1}^2 \text{rotrot} \frac{\mathbf{p}_j(t - R_j/c)}{R_j}, \quad (4.13)$$

где $\mathbf{r}$ — произвольная точка наблюдения, включая точки в местах расположения атомов, $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t)$ — внешнее поле, действующее на систему,

$$\mathbf{p}_j = \frac{1}{2}\mathbf{X}_j e^{-i\omega t} \quad (4.14)$$

— индуцированный дипольный момент j -го атома, c — скорость света в вакууме, $R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$. Уравнение (4.13) в сочетании с уравнениями (4.9) образуют замкнутую систему уравнений, на основе которых

будет проведено описание различных оптических свойств двухатомной квантовой системы. Представим в явном виде поля $\mathbf{E}_{01}$ и $\mathbf{E}_{02}$ в уравнениях (4.9), используя (4.13). Выделим отрицательно-частотные части этих полей, пропорциональные $\exp(-i\omega t)$. Пусть ось двухатомной квантовой системы направлена вдоль оси y . При этом атом 1 имеет радиус-вектор $\mathbf{R}_1$, а атом 2 — радиус-вектор $\mathbf{R}_2$. Тогда поле в месте расположения атомов 1 и 2 имеет вид:

$$\mathbf{E}_{01}(\tau_1) = \frac{1}{2}\mathbf{G}[\mathbf{X}_2], \quad \mathbf{E}_{02}(\tau_2) = \mathbf{E}_{0I}(\tau_2)e^{ik_0\mathbf{R}_2} + \frac{1}{2}\mathbf{G}[\mathbf{X}_1], \quad (4.15)$$

где $\mathbf{E}_{0I}(\tau_2)$ — огибающая импульса внешнего поля как функция запаздывающего времени $\tau_2 = t - R_2/c$, $\mathbf{k}_0$ — волновой вектор внешнего поля, действующего на атом 2, $(1/2)\mathbf{X}_j = \mathbf{p}_{0j}$, $\tau_1 = t - R_1/c$,

$$\hat{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} -F & 0 & 0 \\ 0 & 2G & 0 \\ 0 & 0 & -F \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

параметры диполь-дипольного взаимодействия атомов

$$G = \frac{1}{R^3} - i\frac{k_0}{R^2}, \quad F = G - \frac{k_0^2}{R}, \quad (4.17)$$

символ [...] означает, что соответствующие величины определены в момент времени $\tau_{2(1)} - R/c$. В формулах (4.15) использовано приближение медленных амплитуд, согласно которому в запаздывающих членах,

пропорциональных $\dot{\mathbf{p}}_1$, $\ddot{\mathbf{p}}_1$, отброшены слагаемые, пропорциональные $\dot{\mathbf{p}}_{01}$, $\ddot{\mathbf{p}}_{01}$.

Действующие поля (4.15) в местах расположения атомов двухатомного объекта соответствуют случаю, когда один из атомов объекта облучается внешним импульсным полем, а второй атом наблюдает за поведением первого атома. На основе уравнения (4.15) можно рассмотреть и другие ситуации, например, облучение двухатомной системы непрерывным оптическим излучением, когда расстояние между атомами значительно меньше длины волны внешнего оптического излучения.

5. Уравнения движения для атомных и полевых переменных в сверхтонкой плёнке двухуровневых атомов

В данном параграфе производится вывод полевого и материальных уравнений применительно к случаю сверхтонкой нелинейной пленки резонансных атомов. Эти уравнения образуют самосогласованную систему, позволяющую решить соответствующую граничную задачу. В качестве полевого уравнения используется интегро-дифференциальное уравнение. Преимущество использования метода интегро-дифференциальных уравнений вместо уравнений Максвелла в данном случае состоит в том, что интегро-дифференциальные уравнения нелокальны, а поэтому не требуют явного введения граничных условий. Это является особенно ценным в случае, когда граница раздела двух сред не является бесконечно тонкой.

В качестве материальных уравнений будут использованы оптические уравнения Блоха, описывающие динамику взаимодействия двухуровневого атома со светом. Двухуровневый атом является простой моделью, позволяющей с достаточной точностью описать взаимодействие квазимонохроматического излучения с частотой, близкой к частоте перехода с резонансной средой. Здесь стоит упомянуть ещё об одном преимуществе, предоставляемом методом интегральных уравнений, а именно, и в интегро-дифференциальных уравнениях, и в оптических уравнениях Блоха фигурируют микроскопические поля, что устраняет необходимость установления связи между макро- и микроскопическими величинами.

При выводе самосогласованной системы будет использован ряд приближений. Во-первых, взаимодействие атома с полем будет описываться на основе полуклассического подхода, когда атом рассматривается как квантовая система, а поле предполагается классическим. Это приближение оправдано при больших интенсивностях падающего излучения. Во-вторых, при выводе уравнений Блоха будет использовано приближение вращающейся волны, чтобы избежать рассмотрения эффектов, возникающих на двойной частоте.

Таким образом, ниже будет представлен математический формализм для решения граничных задач нелинейной резонансной оптики дискретно-непрерывных диэлектрических сред на основе интегральных уравнений для микроскопических электромагнитных полей.

5.1. Уравнения Блоха и интегральное полевое уравнение

Рассмотрим взаимодействие резонансных атомов с полем стационарного излучения $\mathbf{E}_I$, где

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}_I E_{0I} \exp(-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) \exp(i\omega t) + \text{к.с.}, \quad (5.1)$$

$\mathbf{e}_I$ — единичный вещественный вектор поляризации, E_{0I} — действительная постоянная величина, $\mathbf{k}_0$ — волновой вектор внешней волны ($k_0 = \omega / c$), ω — частота. В этом случае будем искать решение для поля в плёнке в следующем виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}(E'_0 + iE''_0) \exp(\mathbf{r}\mathbf{N}) \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}) \exp(i\omega t) + \text{к.с.}, \quad (5.2)$$

где $\mathbf{e}$ — единичный вектор поляризации, E'_0 , E''_0 — действительные функции координаты $\mathbf{r}$ точки наблюдения, $\mathbf{K}$, $\mathbf{N}$ — действительные векторы,

$$\mathbf{K} = \frac{\omega}{c}(\mathbf{a}n - \mathbf{b}\kappa), \quad \mathbf{N} = \frac{\omega}{c}(\kappa\mathbf{a} + \mathbf{b}n), \quad (5.3)$$

определяющие комплексный волновой вектор $\mathbf{k} = (\omega/c)(n + i\kappa)(\mathbf{a} + i\mathbf{b})$, где $(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^2 = 1$, т.е. унитарный по квадрату вектор. Пробное решение (5.2) соответствует неоднородной волне, направление распространения которой, в общем случае, не совпадает с направлением затухания. Мы будем рассматривать величины E'_0 , E''_0 , n , κ как неизвестные функции координаты $\mathbf{r}$ и нам предстоит определить эти функции с помощью соответствующих материальных и полевых уравнений. При этом комплексность амплитуды $E'_0 + iE''_0$ волны (5.2) будет обусловлена комплекс-

ностью индуцированного дипольного момента, формирующего внутреннее поле в плёнке, а также конкуренцией кулоновского и запаздывающих поляризуемых полей в поле диполей $\mathbf{E}_d^c$ и $\mathbf{E}_d^d$ непрерывно и дискретно распределённых атомов.

В соответствии с выбором пробного решения (5.2) запишем оператор Гамильтона двухуровневого атома в приближении вращающейся волны следующим образом:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{d}_r \mathbf{e}) (E'_0 + iE''_0) \exp(\mathbf{rN}) \exp(i\omega t) \exp(-i\mathbf{rK}) \sigma_- - \\ - \frac{1}{2} (\mathbf{d}_r \mathbf{e}) (E'_0 - iE''_0) \exp(\mathbf{rN}) \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{rK}) \sigma_+, \quad (5.4)$$

где $\sigma_{\pm}$ — оператор переворачивания эффективных спинов, ω_0 — частота перехода в спектре атома, $\mathbf{d}_r = \mathbf{u}_d d_r$, d_r — абсолютное значение дипольного момента перехода, $\sigma_{\pm} \sim \exp(\pm i\omega t)$. Тогда в представлении Гейзенберга получим замкнутую систему уравнений для $\sigma_{\pm}$, σ_3 . Используем следующее преобразование:

$$\sigma_{\pm} = (u \pm iv) \exp(\pm i\omega t) \exp(\mp i\mathbf{rK}), \quad \sigma_3 = w, \quad (5.5)$$

введем феноменологически времена релаксации T'_2 и T_1 и получим следующую систему уравнений:

$$\dot{u} = -(\omega_0 - \omega)v - \frac{2}{\hbar} (\mathbf{d}_r \mathbf{e}) E''_0 w \exp(\mathbf{rN}) - u / T'_2,$$

$$\dot{v} = (\omega_0 - \omega)u + \frac{2}{\hbar}(\mathbf{d}_r \mathbf{e})E'_0 w \exp(\mathbf{r}\mathbf{N}) - v/T'_2, \quad (5.6)$$

$$\dot{w} = \frac{2}{\hbar}(\mathbf{d}_r \mathbf{e})(E''_0 u - E'_0 v) \exp(\mathbf{r}\mathbf{N}) - (w - w_0)/T_1,$$

где w_0 — начальное значение инверсии. Легко видеть, что при $E''_0 = 0$ уравнения (5.6) переходят в известные оптические уравнения Блоха [1], если предполагать также, что поле E'_0 не зависит от переменных u и v в точке наблюдения $\mathbf{r}=0$.

В качестве полевого уравнения будет использовано интегро-дифференциальное уравнение (1.6.3). При этом вектор поляризации для среды, заполненной двухуровневыми атомами, имеет следующий вид:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2} \frac{N}{V} \mathbf{d}_r (u - iv) \exp(-i\omega t) \quad + \text{к.с.} \quad (5.7)$$

Учитывая (5.1), (5.2), (5.7), выделим в уравнении (1.6.3) отрицательно-частотную часть, пропорциональную $\exp(-i\omega t)$, и преобразуем его к следующему виду:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}(E' - iE'') = \mathbf{e}_I E_{0I} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{N}{V} \left(\int_{V_1+V_2} \int_{V_1} \right) \text{rot rot}[\mathbf{d}_r (u - iv) G(R)] dV' + \\ + \frac{1}{2} \sum_a (u_a - iv_a) \left[\left(\frac{3(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^5} - \frac{\mathbf{d}_r}{R_a^3} \right) - \right. \\ \left. - ik_0 \left(\frac{3(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^4} - \frac{\mathbf{d}_r}{R_a^2} \right) - k_0^2 \left(\frac{3(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^5} - \frac{\mathbf{d}_r}{R_a^3} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

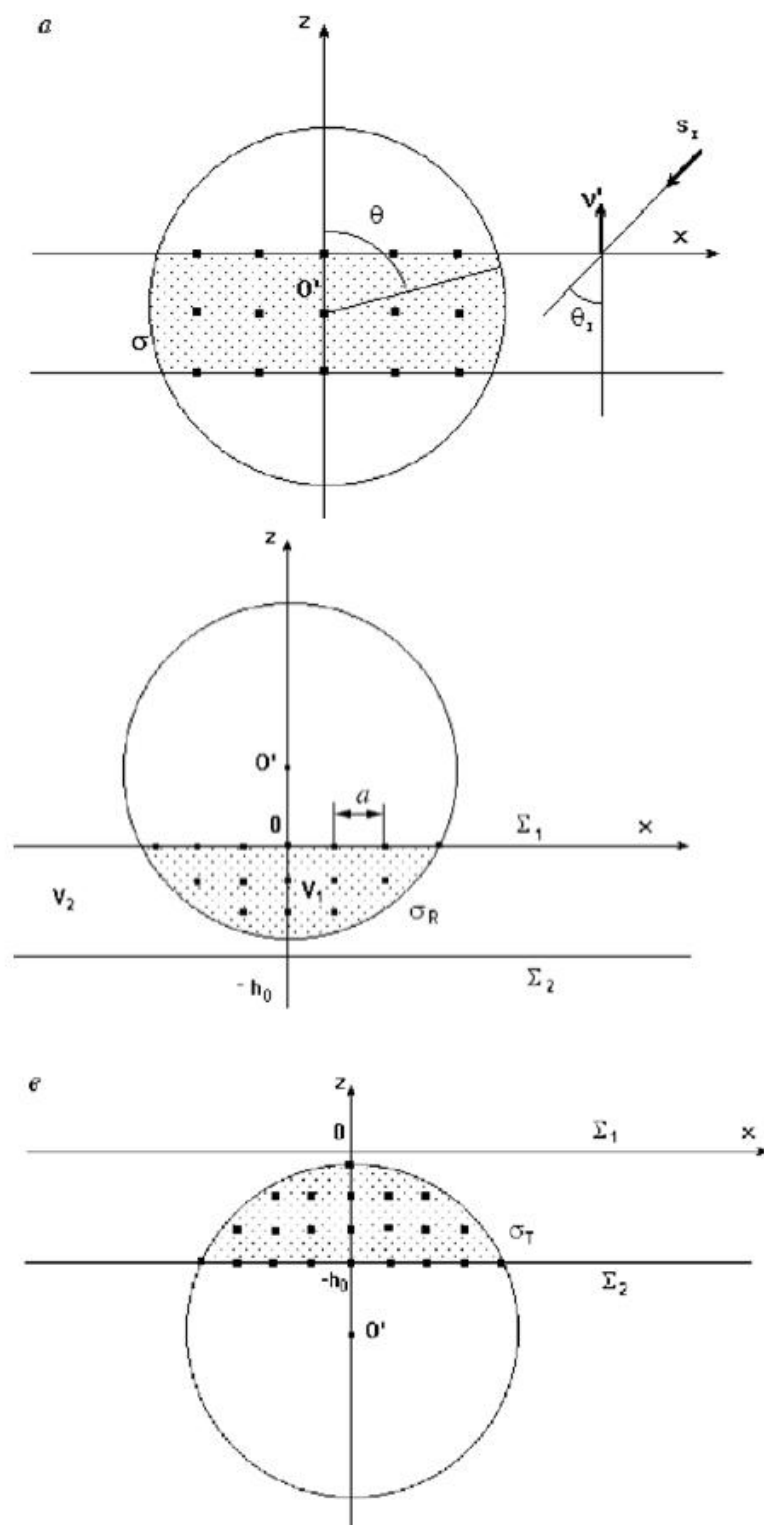


Рис. 4. Схема расположения осей относительно поверхностей Σ_1 и Σ_2 сверхтонкой плёнки.

Здесь V_2 и V_1 означают области непрерывного и дискретного распределений диполей соответственно (рис. 4).

Введём следующее обозначение:

$$(E'_0 \pm iE''_0) \exp(\mathbf{rN}) = E_{\pm}(\mathbf{r}) = E' \pm E''.$$

Тогда неизвестными функциями в замкнутой системе уравнений (5.6), (5.8) можно считать E' , E'' и вектор $\mathbf{K}$. Определив эти величины в точках наблюдения внутри плёнки, станет возможным определить также поле вне пленки.

5.2. Квазидвумерная пленка двухуровневых атомов

Граничная задача в предложенной выше формулировке учитывает тот факт, что величины u , v и w зависят от координаты точки наблюдения внутри плёнки. Эта зависимость, во-первых, обусловлена наличием множителя $\exp(\mathbf{rN})$ в амплитудах E'_0 , E''_0 результирующего поля, действующего на атом в точке наблюдения $\mathbf{r}$. Во-вторых, на различной глубине залегания точки наблюдения в плёнке области V_1 и V_2 дискретного и непрерывного распределения атомов будут различными, поэтому E'_0 , E''_0 будут также зависеть от $\mathbf{r}$. Таким образом, при вычислении поля в плёнке нельзя выносить функции u , v из-под знака интеграла, что существенно усложняет решение поставленной граничной задачи. В этом случае можно использовать приближение квазидвумерной плёнки. Условия квазидвумерности и однородности будут сформулированы ниже. Следствием этого приближения является то, что компоненты вектора Блоха u , v , w предполагаются постоянными по всей толщине плёнки и, следовательно, становится возможным

вынесение их за знак интеграла. Следует заметить, что этот подход не до конца последователен, так как в нём учитывается неоднородность локального поля, но в то же время игнорируется изменение по толщине блоховских переменных, имеющих ту же степень неоднородности, поэтому этот подход будет использоваться лишь в некоторых случаях для получения аналитических зависимостей.

Для решения самосогласованной граничной задачи взаимодействия волны (5.1) со сверхтонкой пленкой резонансных атомов необходимо решить систему связанных уравнений (1.6.3), (5.6). Сначала рассмотрим первый способ решения этой задачи, который, фактически, был использован в эффекте локального поля [27]. Для этого необходимо величины E'_0 , E''_0 выразить через u , v и w с помощью уравнения (1.6.3) и подставить эти величины в уравнения (5.6). Вторым способом решения этой задачи связан с привлечением процедуры Эвальда-Озеена [18] и выделением в уравнении (1.6.3) локальной и нелокальной части. Этот метод будет использоваться при получении выражения для комплексного показателя преломления сверхтонкой плёнки.

Согласно первому способу, выделим в уравнении (1.6.3) отрицательно-частотную часть, пропорциональную $\exp(-i\omega t)$. Тогда после вычислений получим:

$$E'_0 = E_{0I} + Au + Bv, \quad E''_0 = Av - Bu, \quad (5.9)$$

где

$$A = \frac{1}{2} \frac{N}{V} A' + \frac{1}{2} \sum_a \left(\frac{3(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a)(\mathbf{R}_a \mathbf{e})}{R_a^5} - \frac{(\mathbf{d}_r \mathbf{e})}{R_a^3} \right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} \sum_a \left(-\frac{(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a)(\mathbf{R}_a \mathbf{e})}{R_a^3} + \frac{(\mathbf{d}_r \mathbf{e})}{R_a} \right) + \frac{1}{2} \frac{N}{V} B',$$

(5.9a)

$$B = \frac{1}{2} \frac{N}{V} A'' + \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} \sum_a \left(-\frac{3(\mathbf{d}_r \mathbf{R}_a)(\mathbf{R}_a \mathbf{e})}{R_a^4} + \frac{(\mathbf{d}_r \mathbf{e})}{R_a^2} \right) + \frac{1}{2} \frac{N}{V} B''$$

$$A' + iA'' = \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}) \mathbf{e} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{I}_2^{(-)},$$

$$\mathbf{I}_2^{(-)} = \mathbf{d}_r \int_{V_2} G(R) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}') dV', \quad (5.9c)$$

$G(R) = \exp[i(\omega/c)R]/R$ — функция Грина. Объёмный интеграл (5.9c) вычислен в приложении А, где интеграл по объёму V_2 представляется в виде разности интегралов по объёму $V_1 + V_2$ и объёму V_1 соответственно. При этом интеграл по объёму V_1 сводится к поверхностному интегралу по усечённой сфере Лорентца.

Величины B' и B'' в (5.9a), (5.9b) возникают из-за преобразования в уравнении (1.6.3), связанного с выносом оператора $\operatorname{rot} \operatorname{rot}$ за знак объёмного интеграла. Такое преобразование формулируется с помощью известной оптической леммы [15] и применяется в классической [22, 37, 38] и нелинейной оптике [8] для точек наблюдения внутри оптической среды на значительном удалении от поверхности среды.

В работах [22, 37, 38] было проведено обобщение этой леммы на случай, когда точка наблюдения находится в ближней зоне по отношению к поверхности среды и сфера Лорентца является усечённой. В приложении В проведено дальнейшее обобщение оптической леммы для сверхтонкой плёнки, в которой сфера Лорентца имеет радиус больше, чем толщина плёнки. В соответствии с формулой (В.1) получаем

$$B' + iB'' = -\mathbf{e}(\hat{f}\mathbf{d}_r).$$

Выражения (5.9) соответствуют фиксированной точке наблюдения $\mathbf{r}$, которая находится внутри плёнки. Поскольку радиус сферы Лорентца значительно меньше длины волны $2\pi c/\omega$, то можно предположить, что

$$\exp[i(\omega/c)R_a] \approx 1, \quad \exp(\mathbf{r}_a \mathbf{N}) \approx \exp(\mathbf{r} \mathbf{N}), \quad \exp(i\mathbf{r}_a \mathbf{K}) \approx \exp(i\mathbf{r} \mathbf{K}) \quad (5.10)$$

Более того, при получении выражений (5.9) учтено, что поверхности Σ_1 и Σ_2 , ограничивающие плёнку, являются однородными. Это означает, что должны быть выполнены следующие равенства:

$$K_x = k_{0x}, \quad K_y = k_{0y}, \quad N_x = 0. \quad (5.11)$$

Также предполагается, что выполнены условия квазидвумерности плёнки

$$\exp(ik_{Iz}z) \rightarrow 1, \quad \exp(iK_z z) \rightarrow 1, \quad \exp(-zN_z) \rightarrow 1 \quad (5.12)$$

для точек наблюдения внутри пленки ($0 \leq |z| \leq h_0$).

Таким образом, в граничной задаче нелинейной резонансной оптики, в которой рассматривается взаимодействие света с квазидвумерной однородной

плёнкой, неизвестными величинами являются n , κ , E'_0 и E''_0 в различных точках наблюдения.

5.3. Стационарное решение модифицированных оптических уравнений Блоха

Предположим, что длительность импульса внешней волны намного превышает времена релаксации атомных состояний T_1 и T_2' . В этом случае мы имеем установившийся режим с $\dot{u} = \dot{v} = \dot{w} = 0$. Система уравнений (5.6) принимает вид:

$$u - iv = -\frac{\kappa_0(E'_0 - iE''_0)w}{\Delta - i/T_2'},$$

$$\kappa_0(E''_0u - E'_0v) - (w - w_0)/T_1 = 0. \quad (5.13)$$

Здесь использованы следующие обозначения: $\kappa_0 = (2/\hbar)\mathbf{d}_r \cdot \mathbf{e}$; $\Delta = \omega_0 - \omega$ — отстройка от резонанса.

Используя приближение квазидвумерной плёнки, подставим выражения (5.9) в уравнения (5.6). В этом случае получим систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$-\kappa_0 u^2 B - \kappa_0 E_{0I} v - \kappa_0 B v^2 - (w - w_0)/T_1 = 0, \quad (5.14a)$$

$$-(\Delta + \kappa_0 w A)v + (\kappa_0 w B - 1/T_2')u = 0, \quad (5.14b)$$

$$(\Delta + \kappa_0 w A)u + \kappa_0 w E_{0I} + (\kappa_0 w B - 1/T_2')v = 0. \quad (5.14c)$$

Как видно из этих уравнений, внутреннее поле изменяет отстройку от резонанса и это изменение зависит от конкурирующих вкладов кулоновского и запаздывающего поляризующих полей.

Подставляя (5.14с) в (5.14b), получаем следующее выражение, связывающее v и w :

$$v = \frac{\kappa_0 E_{0I} w (1/T'_2 - \kappa_0 B w)}{(\Delta + \kappa_0 A w)^2 + (1/T'_2 - \kappa_0 B w)^2}. \quad (5.15)$$

Подставляя это выражение в (5.14с), получаем аналогичное соотношение для u :

$$u = \frac{-\kappa_0 E_{0I} w (\Delta + \kappa_0 A w)}{(\Delta + \kappa_0 A w)^2 + (1/T'_2 - \kappa_0 B w)^2}. \quad (5.16)$$

После этого, используя выражения (5.14а), (5.15), (5.16), нетрудно получить уравнение для инверсии w :

$$\frac{\kappa_0^2 E_{0I}^2 w}{(\Delta + \kappa_0 A w)^2 + (1/T'_2 - \kappa_0 B w)^2} + \frac{T'_2}{T_1} (w - w_0) = 0, \quad (5.17)$$

или после преобразования к обычному виду

$$a_0 w^3 + b_0 w^2 + c_0 w + d_0 = 0, \quad (5.18)$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= \kappa_0^2 (A^2 + B^2), \\ b_0 &= 2\kappa_0 (\Delta A - B/T'_2) - w_0 \kappa_0^2 (A^2 + B^2), \\ c_0 &= \kappa_0^2 E_{0I}^2 T_1 / T'_2 + (\Delta^2 + 1/T_2'^2) - 2\kappa_0 w_0 (\Delta A - B/T'_2), \\ d_0 &= -w_0 (\Delta^2 + 1/T_2'^2). \end{aligned}$$

Решая уравнение (5.18), можно также определить величины u , v по формулам (5.15), (5.16). Это позволит определить основные оптические свойства сверхтонкой плёнки в точках наблюдения внутри плёнки с учётом эффекта ближнего поля.

Чтобы учесть зависимость u , v , w от координаты z внутри плёнки, можно поступить следующим образом: разобьём весь объём плёнки на систему слоев,

параллельных внешним поверхностям. Толщину каждого слоя выберем такой, что внутри него можно считать компоненты вектора Блоха u , v , w постоянными. В кубической решётке в качестве такого характерного размера можно выбрать постоянную решётки a (рис. 5.1). Таким образом, система уравнений (1.6.3), (5.13) преобразуется к системе $5L$ уравнений, где число 5 определяет число функций u , v , w , E'_0 , E''_0 ; L — число слоев в плёнке. Возможное возникновение бистабильности мы пока учитывать не будем. Интегральное уравнение (1.6.3) тогда переписывается в следующем виде:

$$E'_{0k} - iE''_{0k} = E_{0I} + \sum_{l=0}^{L-1} (A_{kl} + iB_{kl})(u_l - iv_l), \quad (5.19)$$

где

$$A_{kl} + iB_{kl} = \frac{1}{2} \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}_k) \mathbf{e} \left(\frac{N}{V} \int_{V_{2l}} \text{rot rot } \mathbf{d}_r G(R) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}') dV' + \sum_{x,y} \text{rot rot } \mathbf{d}_r G(R) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_l) \right). \quad (5.20)$$

Предположим, что $\mathbf{e}\mathbf{e}_I = 1$, и выделим отрицательно-частотную часть, пропорциональную $\exp(-i\omega t)$.

Интегрирование и суммирование в (5.20) производится внутри l -того слоя объёма V_{2l} . Из (5.20) можно заметить, что A_{kl} и B_{kl} зависят лишь от разности индексов:

$$A_{kl} + iB_{kl} = A_{0,k-l} + iB_{0,k-l}.$$

Подставляя (5.19) в (5.13), получаем для u_k, v_k, w_k систему уравнений:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\mathbf{u} - i\mathbf{v}) &= -\Omega_r \mathbf{1}, \\ (w_k - w_0)/T_1 &= \kappa_0 (E''_{0k} u_k - E'_{0k} v_k), \end{aligned} \quad (5.21)$$

где $\Omega_r = \kappa_0 E_{0I}$ — частота Раби, $\mathbf{1}$ — единичный столбец. Коэффициенты матрицы $\hat{A}$ таковы:

$$a_{kl} = \delta_{kl} (\Delta - i/T'_2) / w_k + \kappa_0 (A_{kl} + iB_{kl}), \quad (5.22)$$

$$(\mathbf{u} - i\mathbf{v})^T = (u_1 - iv_1, u_2 - iv_2, \dots, u_L - iv_L).$$

A_{kl} и B_{kl} определяются из соотношений (5.9а)-(5.9с) путём интегрирования по объёму соответствующего слоя.

Пусть в уравнении (5.18) величины $A=B=0$. Это соответствует отсутствию внутри плёнки внутренних поляризующих полей, изменяющих внешнее поле E_{0I} . Такая ситуация возможна, например, при очень малых концентрациях резонансных атомов.

В этом случае $a_0 = b_0 = 0$, и мы получаем известное решение:

$$w = w_0 \frac{1 + (\Delta T'_2)^2}{1 + (\Delta T'_2)^2 + T_1 T'_2 (\kappa_0 E_{0I})^2}. \quad (5.23)$$

Приложение А

Вычислим объёмный интеграл в (5.9с):

$$\mathbf{I}_2^{(-)} = \mathbf{d}_r \int_{V_2} G(R) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}') dV', \quad (\text{A.1})$$

где предположим, что вектор $\mathbf{K}$ лежит в плоскости xz и

$$R = [(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2]^{1/2} \equiv [x_1^2 + y_1^2 + z_1^2]^{1/2} \quad (\text{A.2})$$

Тогда интеграл (A.1) примет вид:

$$\mathbf{I}_2^{(-)} = -\mathbf{d}_r \exp(iK_x x + iK_z z) \int_{V_2} \frac{\exp(i\omega R/c)}{R} \exp(ipx_1 + qz_1) dx_1 dy_1 dz_1 \quad (\text{A.3})$$

где

$$p = -K_x, \quad q = -K_z.$$

Представим интеграл (A.3) в следующем виде:

$$\mathbf{I}_2^{(-)} = -\mathbf{d}_r \exp(iK_x x + iK_z z) \left\{ \int_{V_1+V_2} \exp(iqz_1) L(z_1) dz_1 - \int_{V_1} \exp(iqz_1) L(z_1) dz_1 \right\} \quad (\text{A.4})$$

где

$$L(z_1) = \iint \frac{\exp[i(px_1 + \frac{\omega}{c} R)]}{R} dx_1 dy_1. \quad (\text{A.5})$$

Вычислим интеграл (A.5), вводя новые переменные:

$$px_1 + \frac{\omega}{c}R = \rho \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}, \quad y_1 = \sqrt{\rho^2 - z_1^2} \sin \chi$$

(A.6)

Тогда

$$L(z_1) = \iint \exp\left[i\rho \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}\right] R^{-1} \frac{\partial(x_1, y_1)}{\partial(\rho, \chi)} d\rho d\chi,$$

(A.7)

где $\partial(x_1, y_1)/\partial(\rho, \chi)$ — якобиан преобразования, элементы которого имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial \rho} &= \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - p^2} \left/ \left(p + \frac{\omega}{c} \frac{x_1}{R} \right) \right., & \frac{\partial x_1}{\partial \chi} &= 0, \\ \frac{\partial y_1}{\partial \rho} &= \frac{\rho \sin \chi}{\sqrt{\rho^2 - z_1^2}}, & \frac{\partial y_1}{\partial \chi} &= \sqrt{\rho^2 - z_1^2 - y_1^2}. \end{aligned}$$

(A.8)

Таким образом,

$$L(z_1) = \iint \exp\left(i\rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - p^2}\right) d\rho d\chi. \quad (A.9)$$

Пределы интегрирования в (A.9) для области $V_1 + V_2$ имеют вид:

$$\rho_{\min} = \frac{(\omega/c) |z_1|}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - K_x^2}}, \quad \chi_{\min} = 0,$$

$$\rho_{\max} = \frac{-K_x R_M + \frac{\omega}{c} \sqrt{2R_M^2 + z_1^2}}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - K_x^2}}, \quad (\text{A.10})$$

$$\sin \chi_{\max} = R_M \left[\frac{\left(-K_x R_M + \frac{\omega}{c} \sqrt{2R_M^2 + z_1^2}\right)^2}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - K_x^2}} - z_1^2 \right]^{-1/2},$$

где $2|R_M|$ — длина плёнки в плоскости $xу$.

В частном случае можно положить $\rho_{\min} = |z_1|$, $\rho_{\max} \rightarrow \infty$, $\chi_{\min} = 0$, $\chi_{\max} = 2\pi$. Поэтому первый член в (A.4), отбрасывая осциллирующий вклад от бесконечности, равен

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_2^{(-)} = & -\mathbf{d}_r \exp(iK_x x + iK_z z) \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}} \times \\ & \times \left\{ \frac{2\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}}{gh} + \frac{\exp[ih(h_0 - |z|)]}{h} - \frac{\exp(-ig|z|)}{g} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

где предполагается, что точка наблюдения находится внутри плёнки с толщиной h_0 и

$$h = q + \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - p^2}, \quad g = q - \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - p^2}. \quad (\text{A.12})$$

Для точки наблюдения перед плёнкой ($z > 0$) имеем вместо (A.11) следующее выражение:

$$-\mathbf{d}_r \exp(iK_x x + iK_z z) \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}} \frac{1}{h} \{\exp[ih(z + h_0)] - \exp(ihz)\}. \quad (\text{A.13})$$

Аналогичным образом получим для первого члена в (A.14) следующее выражение, если точка наблюдения находится за плёнкой ($|z| > h_0$):

$$\mathbf{d}_r \exp(iK_x x + iK_z z) \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}} \frac{1}{g} \{\exp[ig(-|z| + h_0)] - \exp(ig|z|)\}. \quad (\text{A.14})$$

Рассмотрим теперь второй член в (A.4):

$$\mathbf{d}_r \exp[i(K_x x + K_z z)] \int_{V_1} \exp(iqz_1) L(z_1) dz_1 \equiv \mathbf{I}_{2local}^{(-)}.$$

Для вычисления этого интеграла используем сферическую систему координат. Поскольку

$$\mathbf{I}_{2local}^{(-)} = -\mathbf{d}_r \int_{V_1} G(R) \exp(iKr') dV', \quad (\text{A.15})$$

используем стандартную процедуру перехода к поверхностному интегралу по сфере, ограничивающей объём V_1 . Для скалярной функции $F(\mathbf{r}') = \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}')$ и функции Грина $G(R)$ имеем очевидные уравнения:

$$\nabla^2 F + K^2 F = 0, \quad \nabla^2 G + k_0^2 G = 0, \quad k_0 = \omega / c,$$

которые позволяют применить теорему Грина, т.е.

$$\int_{V_1} GF dV' = \frac{1}{K^2 - k_0^2} \int_{\sigma} \left(F \frac{dG}{dR} - G \frac{dF}{dR} \right) dS'.$$

Прямой расчёт для замкнутой сферы с радиусом $L_0 \rightarrow 0$ показывает, что поверхностный интеграл равен $-4\pi F(\mathbf{r})$ в точке наблюдения $\mathbf{r}$ в центре сферы. Вычислим поверхностный интеграл для усечённой сферы, пересекающейся с квазидвумерной плёнкой (рис. 5.1a). Определим для этого производные под знаком интеграла:

$$\frac{dG}{dR} = \left(-\frac{1}{R} + ik_0 \right) G,$$

$$\frac{dF}{dR} = -i(\mathbf{K}\mathbf{n}_0) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{n}_0)R], \quad \mathbf{n}_0 = \mathbf{R}/R.$$

Тогда получим, что

$$\int_{V_1} GF dV' = \frac{1}{K^2 - k_0^2} \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) f(R), \quad (\text{A.16})$$

$$f(R) = \int_{\sigma} \exp[-i(Kn_0)R] G \left[-\frac{1}{R} + ik_0 + i(\mathbf{K}\mathbf{n}_0) \right] R^2 \sin \Theta d\Theta d\varphi.$$

При $k_0 R \ll 1$ получим, что

$$f(R) \approx -2\pi(\cos \Theta_2 - \cos \Theta_1),$$

$$\Theta_1 = \arccos\left(\frac{h_0}{2L_0}\right), \quad \Theta_2 = \Theta_1 + 2 \arcsin\left(\frac{h_0}{2L_0}\right) \quad (\text{A.17})$$

Применим оператор rotrot к выражениям (A.11) и (A.15). Тогда

$$\begin{aligned} \text{rot rot } \mathbf{I}_{2c}^{(-)} = & \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}} \left\{ \frac{2\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2}}{gh} [\mathbf{s}_1[\mathbf{s}_1\mathbf{d}_r]] \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{s}_1)] + \right. \\ & \left. + \frac{\exp(ihh_0)}{h} [\mathbf{s}_2[\mathbf{s}_2\mathbf{d}_r]] \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{s}_2)] - \frac{1}{g} [\mathbf{s}_3[\mathbf{s}_3\mathbf{d}_r]] \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{s}_3)] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

где векторы имеют следующие компоненты: $\mathbf{r} = (x, 0, z)$, $\mathbf{s}_1 = (K_x, 0, K_z)$, $\mathbf{s}_2 = (K_x, 0, K_z + h)$, $\mathbf{s}_3 = (K_x, 0, K_z + g)$. Аналогичным образом вычислим при $R = L_0$:

$$\text{rot rot } \mathbf{I}_{2local}^{(-)} = \frac{1}{K^2 - k_0^2} f(R) [\mathbf{K}[\mathbf{K}\mathbf{d}_r]] \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}).$$

Приложение В. Математическая лемма

Докажем математическую лемму, которая использовалась в п.5.2 и посвящена выводу соотношения коммутации оператора rotrot и интегрального оператора в уравнении (1.6.3), т.е.

$$\text{rot rot } \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \mathbf{Q}(\mathbf{r}') G(R) dV' = \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \text{rot rot } \mathbf{Q}(\mathbf{r}') G(R) dV' + \hat{f} \mathbf{Q}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.1})$$

где $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ — произвольная векторная функция и $G(R) = \exp(ik_0 R)/R$, $\hat{f}$ — тензор, компоненты которого нам предстоит найти. Интегралы в (B.1) берутся по объёму, ограниченному снаружи поверхностью $\Sigma_1 + \Sigma_2$ и внутри — поверхностью сферы σ радиуса L_0 , центр которой находится в точке $\mathbf{r}$; R

обозначает расстояние $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, где $\mathbf{r}'$ — радиус-вектор элемента объёма dV' . Найдём вид тензора $\hat{f}$ для случая, когда, в отличие от [22, 37-39], радиус L_0 больше, чем толщина плёнки h_0 (рис. 5).

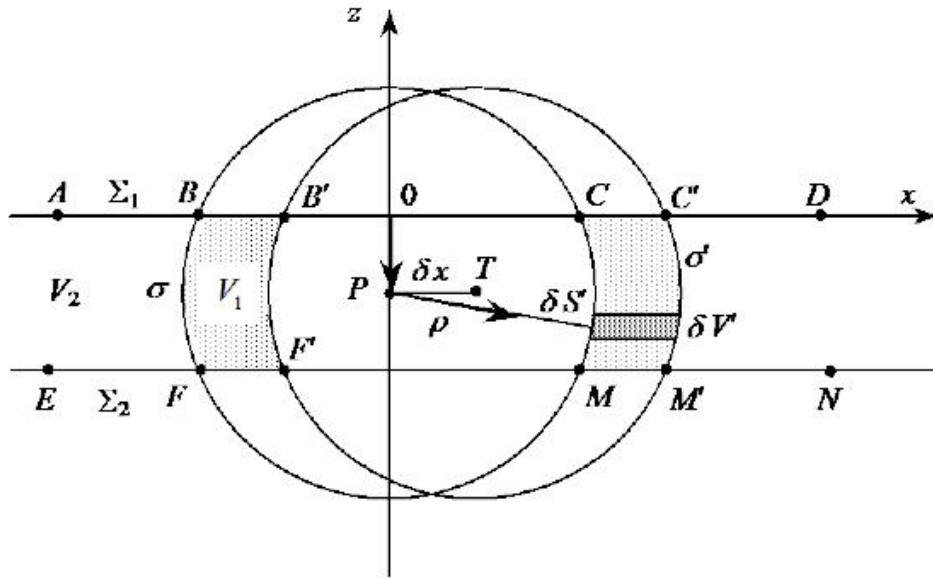


Рис. 5. К доказательству математической леммы

Для x -компоненты векторного оператора rot rot имеем:

$$\begin{aligned} \left(\text{rot rot} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \mathbf{Q} G dV' \right)_x &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} Q_y G dV' + \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} Q_z G dV' - \\ &- \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} Q_x G dV'. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Тогда, для произвольной дифференцируемой скалярной функции $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеем

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} F dV' = \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \frac{\partial F}{\partial x} dV' + \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\delta x} \left[\int_{\sigma'}^{\Sigma'_1 + \Sigma'_2} F dV' - \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} F dV' \right], \quad (\text{B.3})$$

где σ' — поверхность с центром в точке $x + \delta x$, y, z (рис.5.2), Σ'_1 — поверхность между точками AB' и $C'D$, Σ'_2 — поверхность между точками EF' и $M'N$ после пересечения сферы вдоль оси x . Для вычисления предела в (B.3) заметим, что разность двух интегралов характеризует вклады от двух областей, заштрихованных на рис. 5. Элемент объёма можно записать в виде:

$$\delta V' = -\delta S' \delta x \rho_x,$$

где $\delta S'$ — элемент поверхности, ρ_x — x -компонента единичного радиального вектора ρ , выходящего из точки наблюдения P . Следовательно,

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\delta x} \left[\int_{\sigma'}^{\Sigma'_1 + \Sigma'_2} F dV' - \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} F dV' \right] = - \int_{\sigma} F \rho_x dS'. \quad (\text{B.4})$$

Положив $F = Q_j(\mathbf{r})G(R)$, где $j = x, y, z$, получаем следующее правило дифференцирования:

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} (Q_j G) dV' = \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} (Q_j G) dV' - \int_{\sigma} (Q_j G) \rho_x dS'. \quad (\text{B.5})$$

Рассмотрим теперь частные производные второго порядка, применяя правило дифференцирования (B.5). Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \int_{\sigma}^{\Sigma_1+\Sigma_2} (Q_j G) dV' &= \int_{\sigma}^{\Sigma_1+\Sigma_2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} (Q_j G) dV' - \int_{\sigma} \frac{\partial}{\partial X} (Q_j G) \rho_x dS' - \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial X} \int_{\sigma} (Q_j G) \rho_x dS'. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Поскольку

$$\frac{\partial G}{\partial X} = \frac{dG}{dR} \frac{\partial R}{\partial X} = \rho_i \left(\frac{1}{R} - ik_0 \right) G(R)$$

и

$$dS' = L_0^2 \sin \Theta d\Theta d\varphi, \quad \rho_x = (x' - x) / R,$$

то при $k_0 L_0 \ll 1$ и $Q_j(\mathbf{r}') \approx Q_j(\mathbf{r})$ на сфере σ получим, что

$$\begin{aligned} \int_{\sigma} (Q_j G) \rho_x dS' &= 0, \\ \int_{\sigma} \frac{\partial}{\partial X} (Q_j G) \rho_x dS' &= -\pi Q_j (1 - ik_0 L_0) \exp(ik_0 L_0) \left[\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \right]. \end{aligned}$$

В результате проделанных вычислений имеем выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \int_{\sigma}^{\Sigma_1+\Sigma_2} (Q_j G) dV' &= \int_{\sigma}^{\Sigma_1+\Sigma_2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} (Q_j G) dV' - \\ &\quad - \pi Q_j (1 - ik_0 L_0) \exp(ik_0 L_0) \left[\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Аналогичным образом найдём вторую производную по координате z . После необходимых вычислений получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} (Q_j G) dV' &= \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (Q_j G) dV' - \\ &- 2\pi Q_j (1 - ik_0 L_0) \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \exp(ik_0 L_0) + \\ &+ 2\pi Q_j \frac{h_0}{L_0} \exp(ik_0 L_0). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Смешанные вторые частные производные можно вычислить таким же образом. Например, имеем

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} (Q_j G) dV' \rightarrow \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (Q_j G) dV'. \quad (\text{B.9})$$

Подставляя уравнения (B.7), (B.8), (B.9) в (B.2) и пренебрегая величинами порядка $k_0 L_0$, получим

$$\left(\text{rot rot} \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} \mathbf{Q} G dV' \right)_x = \int_{\sigma}^{\Sigma_1 + \Sigma_2} (\text{rot rot } \mathbf{Q} G)_x dV' - \pi Q_x \left(\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \right).$$

Аналогичным образом находим y - и z -компоненты оператора rot rot . Комбинируя все выражения, получим векторную формулу (B.1), где $\hat{f}$ — диагональный тензор с компонентами

$$\begin{aligned} \hat{f}_x = \hat{f}_y &= -\pi \left(\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \right), \\ \hat{f}_z &= 2\pi \left(\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0^3} \right). \end{aligned}$$

Вид тензора $\hat{f}_R$ для точек наблюдения $z > 0$ может быть получен с помощью процедуры, аналогичной той, которая использовалась выше. При этом следует различать три случая:

а) $z > L_0$; сфера σ не пересекает плёнку, тогда $\hat{f}_R \equiv 0$.

б) $L_0 - h_0 \leq z \leq L_0$; сфера σ усечена только с одной стороны. В этом случае имеем:

$$\hat{f}_{xR} = \hat{f}_{yR} = \pi \left(\frac{4}{3} + \frac{3}{L_0} - \frac{z^3}{3L_0^3} \right),$$

$$\hat{f}_{zR} = 2\pi \left(\frac{2}{3} - \frac{z}{L_0} + \frac{z^3}{3L_0^3} \right).$$

в) $0 < z < (L_0 - h_0)$; сфера σ усечена с двух сторон. В этом случае компоненты $\hat{f}_R$ совпадают с компонентами тензора $\hat{f}$:

$$\hat{f}_{xR} = \hat{f}_{yR} = -\pi \left(\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0} \right),$$

$$\hat{f}_{zR} = 2\pi \left(\frac{h_0}{L_0} - \frac{(z + h_0)^3 - z^3}{3L_0} \right).$$

Компоненты тензора $\hat{f}_T$, отвечающего случаю нахождения точки наблюдения за плёнкой, могут быть получены из соответствующих компонент тензора $\hat{f}_R$ путём замены $z \rightarrow -(z + h_0)$.

Приложение С. Уравнения для остальных переменных

Это дополнение поможет читателю в определении необходимых терминов, используемых при выводе уравнений для отдельных переменных. Эти уравнения в сочетании с полевыми уравнениями микроскопической электродинамики применяются при описании различных процессов в наноструктурных объектах.

- Оператор электрического дипольного момента атома $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$, где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор электрона относительно ядра атома

- Матрица дипольного момента двухуровневого атома

$$\mathbf{d}_{mn} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d}_r + i\mathbf{d}_i \\ \mathbf{d}_r - i\mathbf{d}_i & 0 \end{pmatrix},$$

где $\mathbf{d}_r$, $\mathbf{d}_i$ — вещественные векторы, m, n — индексы квантовых состояний атома.

- Вычислим матричные элементы для состояний (211) и (100) атома водорода.

$$\mathbf{d}_{211,100} = \int \Psi_{211}^*(\mathbf{r}) e\mathbf{r} \Psi_{100}(\mathbf{r}) dV$$

Используем известные функции состояний Ψ_{211} , Ψ_{100} атома водорода. Тогда интеграл можно представить в произведении радиального и углового интегралов.

Радиальный интеграл

$$= \int \frac{1}{(2a_0^2)^{3/2}} e^{-\frac{r}{2a_0}} e r \frac{2r}{a_0\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{a_0}} r^2 dr.$$

Угловой интеграл

$$= \int Y_{11}^*(\theta, \varphi)(x \sin \theta \cos \varphi + y \sin \theta \sin \varphi + z \cos \theta) Y_{00}(\theta, \varphi) d\Omega.$$

Оба интеграла легко вычисляются, и после вычислений получим

$$\mathbf{d}_{211,100} = -\frac{2^7}{3^5} e a_0 (\mathbf{x} - i\mathbf{y}),$$

где $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ — орты координатных осей. Следовательно,

$$\mathbf{d}_r = -\frac{2^7}{3^5} e a_0 \mathbf{x}, \quad \mathbf{d}_i = \frac{2^7}{3^5} e a_0 \mathbf{y},$$

где a_0 — боровский радиус.

- Собственный дипольный момент атома (квантовой системы в состоянии m).

$$\mathbf{d}_{mn} = \int \Psi_m^* \mathbf{d} \Psi_m dV = 0.$$

- Индуцированный электрический дипольный момент

$$\langle \mathbf{d} \rangle = \alpha \mathbf{E},$$

где $\mathbf{E}$ — напряжённость электрического поля в месте расположения атома, α — квантовая поляризуемость.

Для изолированного резонанса с частотой ω_0 , шириной резонанса $\frac{1}{T_2'}$ и дипольным моментом перехода $\mathbf{d}_0$ имеем

$$\alpha = \frac{2|\mathbf{d}_0|^2}{\hbar} \frac{1}{\omega_0 - \omega - \frac{i}{T_2'}},$$

где ω — частота внешнего излучения.

- Классическая поляризуемость осциллятора.

$$\alpha = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - \frac{i\omega}{T}},$$

где T — полное время затухания осциллятора, e , m — заряд и масса электрона.

- Сила осциллятора

$$f = \frac{2m\omega_0}{\hbar e^2} |\mathbf{d}_0|^2.$$

- Вероятность в 1 сек излучения фотона

$$P_{nm}^+ = \bar{N} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{nm}|^2,$$

$\bar{N}$ — среднее число фотонов при температуре T .

$$\bar{N} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

- Вероятность в 1 сек поглощения фотона.

$$P_{mn}^- = \bar{N} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{mn}|^2.$$

- Вероятность спонтанного излучения в 1 сек в направлении телесного угла $d\Omega$.

$$dP_{nm}^+ = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{n}\mathbf{d}_{nm}|^2 d\Omega,$$

$\mathbf{n}$ — единичный вектор поляризации фотонов.

- Время жизни возбуждённого состояния атома в двухуровневом приближении

$$\tau = \frac{1}{W_{sp}} = \left(\frac{4 |\mathbf{d}|^2 \omega_0^3}{3 \hbar c^3} \right)^{-1},$$

$\mathbf{d}$ — матричный элемент дипольного момента атома, $\mathbf{d} = \langle 2 | \mathbf{d} | 1 \rangle$, ω_0 — частота квантового перехода.

- Естественная ширина атомных уровней

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}.$$

Для атома натрия, резонансно поглощающего излучение с длиной волны $\lambda = 5890 \text{ \AA} = 589 \text{ нм}$ на переходе из основного состояния $3S$ в возбужденное состояние $3P$ (желтая линия атома натрия) естественная ширина линии перехода равна 10 МГц .

- Правила отбора электрических дипольных квантовых переходов.

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1,$$

l — орбитальное квантовое число атома, m — магнитное квантовое число.

- Уравнения движения для компонент псевдоспина ρ во вращающейся системе координат.

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -(\omega_0 - \omega)v, & \dot{v} &= (\omega_0 - \omega)u + \kappa E_0 w, \\ \dot{w} &= -\kappa E_0 v, \end{aligned}$$

где $\rho(u, v, w)$, w — инверсия двухуровневого атома,

$$\kappa E_0 \equiv \frac{2d}{\hbar} (\mathbf{d}_r \mathbf{E}_0), \quad \mathbf{E}_0 \text{ — амплитуда электрического поля внешней волны.}$$

- Уравнения движения для компонент псевдоспина ρ в векторном виде.

$$\frac{d}{dt}\rho = [\Omega \times \rho],$$

где $\Omega \equiv (-\kappa E_0, 0, \omega_0 - \omega)$ — вращающий момент.

- Индуцированный дипольный момент двухуровневого атома.

$$\mathbf{p} = \mathbf{d}_r (u - iv) \exp(-i\omega t),$$

где $\mathbf{d}_r$ — реальная часть матричного элемента $\mathbf{d}_{mn}$ перехода $n \rightarrow m$.

- Индуцированный дипольный момент атома в локальном поле $\mathbf{E}_0$.

$$\mathbf{p} = \mathbf{X} e^{-i\omega t},$$

где $\mathbf{X}$ удовлетворяет системе уравнений:

$$\dot{\mathbf{X}} = -i\mathbf{X}\Delta - \frac{2i}{\hbar} |\mathbf{d}_0|^2 \mathbf{E}_0 - \frac{1}{T_2'} \mathbf{X},$$

$$\dot{w} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{X}^* \mathbf{E}_0 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{X} \mathbf{E}_0^* - \frac{w - w_0}{T_1},$$

$\Delta = \omega_0 - \omega$, ω_0 — частота квантового перехода, $\mathbf{d}$ — дипольный момент квантового перехода, T_2' , T_1 — времена фазовой и энергетической релаксации соответственно.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963).
2. Давыдов А. С. *Квантовая механика* (М.: Физматгиз, 1963).
3. Борн М, Хуан Кунь. *Динамическая теория кристаллических решёток* (М.: ИЛ, 1958).
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Теория поля* (М.: Физматгиз, 1960).
5. Darwin C. G. Trans. Cambr. Philos. Soc. **23** 137 (1924).
6. Гадомский О. Н., Нагибаров В. Р., Соловаров Н. К. *ЖЭТФ* **63** 813 (1973).
7. Гадомский О. Н., Нагибаров В. Р., Соловаров Н. К. *ЖЭТФ* **70** 435 (1976).
8. Гадомский О. Н., Власов Р. А. *Оптическая эхоспектроскопия поверхности* (Минск: Навука и тэхніка, 1990).
9. Landau L. D. Phys. Z. Sowjetunion **8** 487 (1935).
10. Bethe H., Fermi E. Z. Phys. **77** 296 (1932).
11. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. *Квантовая электродинамика* (М.: Физматгиз, 1959).
12. Kreit G. Phys. Rev. **34** 553(1929).
13. Chang C. S., Stehle P. Phys. Rev. A **4** 630 (1971).
14. Федюшин Б. К. *ЖЭТФ* **22** 140 (1952).
15. Лифшиц Е. М. *ЖЭТФ* **18** 562 (1948).
16. Drake G. W. F. Phys. Rev. A **5** 1979 (1972).
17. Гадомский О. Н., Алтунин К. К. *ЖЭТФ* **114** 1555 (1998).
18. Борн М., Вольф Э. *Основы оптики* (М.: Наука, 1973). с. 106.
19. Gadomsky O. N., Krutitsky K. V. J. European Opt. Soc. B **9** 343 (1997).
20. Исимару А. *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах* (М.: Мир, 1981).
21. Гадомский О. Н., Гадомская И. В., Мойсеев С. Г. Изв. РАН. Сер. физ. **62** 293 (1998).

22. Gadomsky O.N., Krutitsky K.V. J. Opt. Soc. Am. B **13** 1679 (1996).
23. Krutitsky K.V., Suhov S.V. J. Phys. B **30** 5341 (1997).
24. Аллен Л., Эберли Дж. *Оптический резонанс и двух-уровневые атомы* (М.: Мир, 1978).
25. Bowden C. M., Dowling J. P. Phys. Rev. A **47** 1247 (1993).
26. Bowden C. M., Dowling J. P. Phys. Rev. A **49** 1514 (1994).
27. Benedict M. G., Malyshev V. A., Trifonov E. D., Zaitsev A. I. Phys. Rev. A **43** 3845 (1991).
28. Jarque E. C., Malyshev V. A., Roso L. J. Mod. Opt. **44** 563 (1997).
29. Malyshev V. A., Jarque E. C. J. Opt. Soc. Am. B **14** 1167 (1997).
30. Малышев В. А., Конехеро Харке Э. Опт. и спектр. **82** 630 (1997).
31. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. A **49** 1313 (1994).
32. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. A **50** 714 (1994).
33. Ghiner A. V., Surdutovich G. I. Phys. Rev. E **56** 6123 (1997).
34. Гадомский О. Н., Воронов Ю. Ю. Опт. и спектр. **87** 1017 (1999).
35. Malyshev V., Moreno P. Phys. Rev. A **53** 416 (1996).
36. Гадомский О. Н., Абрамов Ю. В. Опт. и спектр. **93** 953 (2002).
37. Гадомский О. Н., Крутицкий К. В. ЖПС **63** 278 (1996).
38. Gadomsky O. N., Krutitsky K. V. Proc. SPIE **2799** 77 (1996).
39. Гадомский О. Н., Крутицкий К. В. ЖЭТФ **106** 936 (1994).