ISSN 0002-3035

ՓԻԶԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS

**ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ**

**ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ**

**PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA**

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 6 раз в год
на русском, армянском и английском языках.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Вл. М. Арутюнян, главный редактор
Э. Г. Шароян, зам. главного редактора
Вил. М. Арутюнян
А. А. Ахумян
Г. А. Вартапетян
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
В. О. Папанян
А. А. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱՎԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

Վլ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
Է. Գ. Շարոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Վիլ. Մ. Հարությունյան
Ա. Ա. Հախումյան
Հ. Հ. Վարդապետյան
Է. Մ. Ղազարյան
Ա. Հ. Մելիքյան
Ա. Ռ. Մկրտչյան
Վ. Օ. Պապանյան
Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

Vi. M. Aroutiounian, editor-in-chief
E. G. Sharoyan, associate editor
Vil. M. Harutyunyan
A. A. Nakhumyan
H. H. Vartapetian
E. M. Kazarian
A. O. Melikyan
A. R. Mkrтчyan
V. O. Papanyan
A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

Адрес редакции: Республика Армения, 375019,
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
375019, Երևան, Մարշալ Բաղրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g, Marshal Bagramyan Av.,
Yerevan, 375019, Republic of Armenia.

УДК 530.12

КВАНТОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ СКАЛЯРНЫХ ЧАСТИЦ
ДВИЖУЩИМИСЯ ЗЕРКАЛАМИ. I.

Л. Ш. ГРИГОРЯН, А. А. СААРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 26 ноября 1996г.)

С помощью теории возмущений исследовано излучение квантов скалярного поля зеркалами, движущимися ускоренно в вакууме пространства-времени Минковского. Методом коэффициентов Боголюбова получена формула для числа квантов заданной моды, применимая для довольно общего класса законов движения зеркал.

Введение. Наличие у вакуума не тривиальных свойств является одним из интереснейших следствий квантовой теории поля. Вакуум представляет собой состояние постоянного неупорядоченного движения, в котором поля испытывают случайные флуктуации, аналогичные нулевым колебаниям гармонического осциллятора. Как и в случае любой другой системы, свойства вакуума проявляются в его отклике на внешние возмущения. В роли таких возмущений могут выступать внешние поля или граничные условия, ограничивающие область квантования или изменяющие топологию пространства. Например, для квантованного электромагнитного поля роль подобных границ могут играть поверхности проводников. Воздействие неподвижных идеальных проводников на вакуумные нулевые колебания приводит к эффекту поляризации вакуума, т. е. к зависимости вакуумных средних локальных наблюдаемых величин (например, тензора энергии-импульса) от расположения и формы проводников. Хорошо известным проявлением подобного эффекта является возникновение далекодействующих сил между незаряженными проводящими телами, известное под названием эффекта Казимира [1—3].

Другим проявлением свойств вакуума является квантовое излучение ускоренными зеркалами (согласно принятой терминологии, под зеркалом мы понимаем поверхность, на которой оператор поля удовлетворяет условию идеального отражения). Это явление детально исследовалось ввиду его формальной близости к задаче о квантовом рождении частиц в гравитационном поле черной дыры [4—6]. Задача об излучении безмассовых частиц движущимися зеркалами в двумерном пространстве-времени допускает точное решение независимо от вида траектории зеркала [7] (см. также [8,9]). Это связано с тем, что классическая задача с нестационарными граничными условиями в двумерии конформно эквивалентна статической задаче. Для более высоких размерностей это не так, и известны

Лишь частные результаты, относящиеся к излучению плоского зеркала, движущегося равноускоренно в направлении, перпендикулярном его поверхности [10], и к равноускоренно расширяющемуся зеркалу сферической формы [11]. Исследовано также излучение ускоренного тела конечных размеров в области больших длин волн [12]. Излучение плоского зеркала, колеблющегося как целое, в первом исчезающем приближении по амплитуде колебаний рассмотрено в [13]. Отметим, что в этих задачах нетривиальным является вопрос о связи между излученной энергией и числом излученных частиц [14]. В частности, известны случаи, когда зеркало не излучает энергию, но испускает частицы. С эффектом квантового излучения движущимися зеркалами тесно связан широко обсуждаемый в последние годы вопрос о возбуждении детектора при ускоренном движении в вакууме Минковского [9,15—20]. Случай детектора, движущегося в области между двумя параллельными пластинами, рассмотрен в работе [21].

Отметим, что во всех этих явлениях возможно нарушение слабого условия энергодоминантности [22] в форме отрицательной плотности энергии [15,23]. Это обстоятельство может приводить к макроскопическим следствиям, включая нарушение второго закона термодинамики [24,25] и так называемого принципа космической цензуры [26,27].

Настоящая работа посвящена квантовому излучению скалярных частиц медленно движущимися зеркалами. В §2 развит метод вычисления поля в любом порядке теории возмущений по малому отклонению поверхности зеркала от статического случая, для которого решение соответствующей граничной задачи предполагается известным. На основе этих результатов в §3 найдены коэффициенты Боголюбова, связывающие in- и out-вакуумные состояния, и выведена формула для числа излученных квантов. Примеры приложения общей формулы будут рассмотрены во второй части данной работы.

2. *Возмущения скалярного поля движущимися зеркалами.* Рассмотрим скалярное поле $\varphi(x)$ в области пространства-времени с границей S , на которой поле равно нулю (везде, где особо не оговорено, принята система единиц $c = \hbar = 1$):

$$(\square + m^2)\varphi(x) = 0, \quad \varphi(x)|_S = 0, \quad (1)$$

x —пространственно-временная точка, $\square$ —оператор Даламбера. Пусть гиперповерхность S мало отличается от гиперповерхности S_0 соответствующей статической задаче, для которой решение $\varphi_0(x)$ граничной задачи (1) известно. При этом мы полагаем, что $\varphi \rightarrow \varphi_0$ при $t \rightarrow \pm \infty$. Поле представим в виде суммы

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \tilde{\varphi}(x), \quad (\square + m^2)\tilde{\varphi}(x) = 0, \quad (2)$$

где $\tilde{\varphi}(x)$ —возмущение, обусловленное отклонением S от S_0 . С помощью формулы Грина его можно представить в виде

$$\bar{\varphi}(x) = \int_{S_0} \bar{\xi}^i(x') \partial'_i G_0^R(x, x') d\Sigma'^i \quad (3)$$

($\partial'_i = \partial/\partial x'^i$) с запаздывающей функцией Грина $G_0^R(x, x')$ для границы S_0 :

$$(\square + m^2)G_0^R(x, x') = (\square' + m^2)G_0^R(x, x') = \delta(x - x'), \quad (4)$$

$$G_0^R(x, x')|_{x \in S_0} = G_0^R(x, x')|_{x' \in S_0} = 0, \quad G_0^R(x, x') = 0 \text{ при } t < t'.$$

Пусть вектор $\xi^i(x)$ описывает смещение точек поверхности S от S_0 :

$$x^i + \xi^i(x) \in S \text{ при } x^i \in S_0. \quad (5)$$

Считая ξ^i малым возмущением, представим $\bar{\varphi}$ в виде разложения

$$\bar{\varphi}(x) = \sum_{l=1}^{\infty} \varphi_l(x), \quad (6)$$

в котором $\varphi_l \sim |\xi|^l$ являются решением волнового уравнения. Слагаемое φ_l удовлетворяет граничным условиям

$$\varphi_l(x)|_{x \in S_0} = -\xi^i(x) [\partial'_i \varphi_{l-1}(x) + \frac{1}{2} \xi^k(x) \partial'_k \partial'_i \varphi_{l-2}(x) + \dots]_{x \in S_0}, \quad l=1, 2, \dots \quad (7)$$

Последние вытекают из $\varphi(x)|_{x \in S} = 0$ в приближении $|\xi|^l$. Используя (3) и (7), приходим к следующей формуле для возмущения поля l -ого порядка:

$$\varphi_l(x) = - \int_{S_0} \xi^i(x') [\partial'_i \varphi_{l-1}(x') + \frac{1}{2} \xi^k \partial'_k \partial'_i \varphi_{l-2}(x') + \dots] \partial'_n G_0^R(x, x') d\Sigma'^n. \quad (8)$$

В частности, в первом порядке [13]

$$\varphi_1(x) = - \int_{S_0} \xi^i(x') \partial'_i \varphi_0(x') \partial'_n G_0^R(x, x') d\Sigma'^n. \quad (9)$$

Поправки более высокого порядка находятся аналогичным образом путем последовательного применения формулы (8).

3. *Коэффициенты Боголюбова.* Пусть $\{\varphi_{in}, \varphi_{in}^*\}$ — полная ортонормированная система собственных функций с набором квантовых чисел ν , являющаяся решением граничной задачи (1) в частном случае $S = S_0$. В общем случае $S \neq S_0$ поправки первого порядка к соответствующим функциям определяются формулой (9)

$$\varphi_{1\nu}^R = - \int_{S_0} \xi^i(x') \partial'_i \varphi_{0\nu}(x') \partial'_n G_0^R(x, x') d\Sigma'^n, \quad (10)$$

где индекс R в левой части указывает на запаздывающую функцию, реализующую in-вакуумное состояние. Аналогичную формулу с опережающей функцией Грина G_0^A можно получить и для опережающей функции $\varphi_{1\nu}^A$, реализующей out-вакуумное состояние. Коэффициенты

преобразования Боголюбова между in- и out-вакуумными состояниями определяются соотношениями [8, 9]

$$\alpha_{\nu\nu'} = (\varphi_{\nu'}^R, \varphi_{\nu}^A), \quad \beta_{\nu\nu'} = -(\varphi_{\nu'}^R, \varphi_{\nu}^{A*}) \quad (11)$$

со скалярным произведением

$$(\varphi, \chi) = -i \int_{\sigma} \{ \varphi(x) \partial_0 \chi^*(x) - [\partial_0 \varphi(x)] \chi^*(x) \} d^3x, \quad (12)$$

где σ обозначает пространственноподобную гиперповерхность (значение (φ, χ) не зависит от выбора σ). Число квантов моды ν' выражается через коэффициент $\beta_{\nu\nu'}$ следующим образом:

$$n(\nu') = \int |\beta_{\nu\nu'}|^2 d\nu. \quad (13)$$

В первом приближении по отклонениям ξ^i для коэффициентов $\beta_{\nu\nu'}$ из (11) имеем

$$\beta_{\nu\nu'} \approx -(\varphi_{\sigma\nu}, \varphi_{\nu'}^{A*}) - (\varphi_{\sigma\nu}^*, \varphi_{\nu'}). \quad (14)$$

С учетом (10) ясно, что для определения $\beta_{\nu\nu'}$ достаточно вычислить скалярные произведения

$$(\varphi_{\sigma\nu}(x), G_0^{A*}(x, x')) \text{ и } (G_0^R(x, x'), \varphi_{\sigma\nu}^*(x)) \quad (15)$$

(переменной интегрирования является x). Воспользовавшись известными формулами

$$G_0^R(x, x') = -\theta(t-t') G_0(x, x'), \quad G_0^A = \theta(t'-t) G_0(x, x'), \quad (16)$$

$$G_0(x, x') = -i \langle [\varphi(x), \varphi(x')] \rangle, \quad \langle \varphi(x) \varphi(x') \rangle = \sum \varphi_{\sigma\nu}(x) \varphi_{\sigma\nu}^*(x'),$$

где угловые скобки означают усреднение по невозмущенному вакуумному состоянию, а $\theta(t-t')$ — функция Хевисайда, нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} (\varphi_{\sigma\nu}(x), G_0^{A*}(x, x')) &= i\theta(t'-t) \varphi_{\sigma\nu}(x'), \\ (G_0^R(x, x'), \varphi_{\sigma\nu}^*(x)) &= i\theta(t-t') \varphi_{\sigma\nu}(x'). \end{aligned} \quad (17)$$

При этом учтены условия ортонормировки системы собственных функций $\{\varphi_{\sigma\nu}, \varphi_{\sigma\nu}^*\}$:

$$(\varphi_{\sigma\nu}, \varphi_{\sigma\nu'}) = -(\varphi_{\sigma\nu}^*, \varphi_{\sigma\nu'}^*) = \delta_{\nu\nu'}, \quad (\varphi_{\sigma\nu}, \varphi_{\sigma\nu'}^*) = 0. \quad (18)$$

Подставляя (10) и аналогичную формулу для φ_{ν}^A в (14) и учитывая (17), а также, что для статической задачи с $S=S_0$ временная компонента вектора нормали к S_0 равна нулю ($n^0=0$), приходим к формуле

$$\beta_{\nu\nu'} = i \int_{S_0} n^k [\partial_k^i \varphi_{\sigma\nu}(x')] [\partial_k^j \varphi_{\sigma\nu'}(x')] \delta(x-x') d\Sigma', \quad (19)$$

где n^i — вектор, ортогональный гиперповерхности S_0 , $d\Sigma^i = n^i d\Sigma'$, $\xi^i = n^i \xi$.

Необходимым условием справедливости приведенного выше метода вычисления коэффициентов преобразования Боголюбова является условие $|\partial \xi^i / \partial x^m| \ll 1$. В частности, отсюда следует малость скоростей смещения точек поверхности S по сравнению со скоростью света.

Выше был рассмотрен случай скалярного поля с граничным условием Дирихле. Аналогичным образом можно исследовать случай граничных условий Неймана, а также смешанных граничных условий. Более того, использованный метод нетрудно обобщить для полей с высшими спинами (наиболее важным с практической точки зрения является случай электромагнитного поля). Конкретные приложения полученной общей формулы (19), включая случай волны, возбужденной на поверхности зеркала, будут рассмотрены во второй части данной работы.

Авторы признательны участникам общепитетовского семинара ИППФ НАН Армении и, в частности, акад. А. Р. Мкртчяну за ценные обсуждения и критические замечания.

Работа выполнена в рамках гранта 96-703 Министерства образования и науки Республики Армения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. В. G. Casimir. Proc. Kon. Ned. Akad. Wetensch. A, 51, 793 (1948).
2. G. Plunien, B. Muller, W. Greiner. Phys. Rep., 134, 87 (1986).
3. В. М. Мостепаненко, Н. Н. Трунов. Эффект Казимира и его приложения. М., Энергоатомиздат, 1990.
4. W. Hawking. Phys. Rev., D, 13, 191 (1976).
5. Б. С. Де Витт. В сб. «Черные дыры». М., Наука, 1978, с. 66.
6. P. Candelas. Phys. Rev., D, 21, 2185 (1980).
7. S. A. Fulling, P. C. W. Davies. Proc. Roy. Soc., A348, 393 (1976).
8. А. А. Гриб, С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко. Квантовые эффекты в интенсивных внешних полях. М., Атомиздат, 1980.
9. Н. Биррел, П. Девис. Квантованные поля в искривленном пространстве-времени. М., Мир, 1984.
10. P. Candelas, D. Deutch. Proc. Roy. Soc., A354, 79 (1977).
11. Е. М. Серебряный, В. П. Фролов. В кн.: Теоретико-групповые методы в физике. М., Наука, 1980, т. 1, с. 274.
12. В. Е. Курьян, В. П. Фролов. Труды ФИАН, 169, 169 (1986).
13. L. H. Ford, A. Vilenkin. Phys. Rev. D, 25, 2569 (1982).
14. W. R. Walker. Phys. Rev. D, 31, 767 (1985).
15. W. G. Unruh. Phys. Rev. D, 14, 870 (1976).
16. W. G. Unruh, R. M. Wald. Phys. Rev. D, 29, 1047 (1984).
17. В. Л. Гинзбург, В. П. Фролов. УФН, 153, 633 (1987).
18. A. Higuchi, G. E. A. Matsas. Phys. Rev. D, 46, 3450 (1992).
19. L. H. Ford, P. G. Grove, A. C. Ottewill. Phys. Rev. D, 46, 4566 (1992).
20. B. V. Svaiter, N. F. Svaiter. Phys. Rev. D, 46, 5267 (1992).
21. L. H. Ford, T. A. Roman. Phys. Rev. D, 48, 776 (1993).
22. С. Хокинг, Дж. Эллис. Крупномасштабная структура пространства-времени. М., Мир, 1977.

23. L. S. Brown, G. J. Maclay. Phys. Rev., 184, 1272 (1969).
24. L. H. Ford. Proc. Roy. Soc., A364, 227 (1988).
25. A. Ottewill, Sh. Tagaki. Prog. Theor. Phys., 79, 429 (1988).
26. L. H. Ford, T. A. Roman. Phys. Rev. D, 41, 3662 (1990).
27. L. H. Ford, T. A. Roman. Phys. Rev. D, 46, 11328 (1992).

**ՍԿԱԼԱՐ ՄԱՍՆԻԿՆԵՐԻ ՔՎԱՆՏԱՑԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅՔՈՒՄԸ
ՇԱՐԺՎՈՂ ՀԱՅԵԿՆԵՐՈՎ, I.**

Լ. Շ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ա. Ա. ՍԱՀԱՐՅԱՆ

Խոտորումների տեսության շեղումներով է Մինկովսկու տարածա-ժամանակի վաղուցում արագացումով շարժվող հայեկների կողմից սկալար դաշտի քվանտների առաքումը: Բողոլյուբովի գործակիցների եզանակով ստացված է բանաձև տվյալ մոդայի քվանտների թվի համար, որը կիրառելի է շարժման օրենքների բավական լայն դասի համար:

**QUANTUM RADIATION OF SCALAR PARTICLES
BY MOVING MIRRORS. I.**

L. Sh. GRIGORIAN, A. A. SAHARIAN

The radiation of scalar field's quanta by accelerated mirrors, moving in the Minkowski space-time, is investigated within the framework of the perturbation theory. The formula for a number of particles produced in a given mode and applicable to a rather wide class of mirrors trajectories, is derived using the method of Bogoliubov's coefficients.

ПРИМЕНЕНИЕ АТОМ-АТОМ ПОТЕНЦИАЛОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПЛАСТИЧЕСКИХ И ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ.

II. ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ

Д. А. БАДАЛЯН, Р. М. АБРАМЯН

Ереванский государственный университет
Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 22 декабря 1996 г.)

Предложен способ расчета парной энергии взаимодействия мезогенных молекул, основанный на двухцентровом разложении потенциала молекул в атом-атомном приближении (ААП) по сферическим функциям. В качестве конкретного приложения рассмотрено взаимодействие двух молекул параазоксианизола (ПАА). Для этого вещества вычислена температура потери устойчивости фазового перехода нематический жидкий кристалл—изотропная жидкость.

Термодинамические свойства жидких кристаллов, их кинетические характеристики определяются характером межмолекулярных взаимодействий. В микроскопических расчетах межмолекулярного взаимодействия в жидких кристаллах типичными расстояниями являются расстояния порядка молекулярных размеров или намного меньше. Поэтому необходимо использовать такое выражение для энергии взаимодействия, которое справедливо при произвольных расстояниях между центрами тяжести молекул. Полученные в [1] формулы удовлетворяют этим требованиям. Формула (15) в [1]

$$V_{12} = \sum_{n_1, n_2} W_{n_1, n_2}^{m, m', m''}(\mathbf{R}) \cdot D_{m, m'}^{n_1}(\omega) D_{m', m''}^{n_2}(\omega') \quad (1)$$

выражает энергию взаимодействия двух молекул через расстояние между центрами тяжести и сферические углы, характеризующие ориентации молекул относительно систем координат, связанных с общей осью $z(z')$. Ясно, что при расчете энергии кристалла, когда производится суммирование потенциалов V_{12} по всем парам молекул, ориентации молекул и направления векторов $\{\mathbf{R}\}$ удобно описать относительно одной жестко связанной с кристаллом координатной системы (лабораторной системы координат). Для нематических жидких кристаллов (НЖК) одна из осей лабораторной системы совпадает с направлением директора—преимущественной ориентации молекул. Поэтому необходимо дальнейшее преобразование потенциала (1).

Введем углы Эйлера $\omega_1 = (\alpha_1, \beta_1, \gamma_1)$, $\omega_2 = (\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$ и $\omega_k = (\alpha_k, \beta_k, \gamma_k)$, реализующие поворот лабораторной системы координат в системы $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$, $\{\bar{x}', \bar{y}', \bar{z}'\}$ и $\{x, y, z\}$ (либо $\{x', y', z'\}$ соответственно). Здесь и далее обозначения совпадают с обозначениями работы [1].

Обратные повороты, переводящие указанные системы координат в лабораторную, описываются углами Эйлера $(-\gamma_1, -\beta_1, -\alpha_1)$, $(-\gamma_2, -\beta_2, -\alpha_2)$ и $(-\gamma_k, -\beta_k, -\alpha_k)$ соответственно. Рассмотрим поворот, переводящий систему $\{x, y, z\}$ в $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$ как результат двух последовательных поворотов $\{x, y, z\} \rightarrow$ лаб. система $\rightarrow \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$, а поворот $\{x', y', z'\}$ в $\{\bar{x}', \bar{y}', \bar{z}'\}$ как $\{x', y', z'\} \rightarrow$ лаб. система $\rightarrow \{\bar{x}', \bar{y}', \bar{z}'\}$.

Формулы сложения, описывающие соответствующие повороты с помощью углов Эйлера, выражаются следующим образом [2]:

$$D_{mM}^{n_1}(\omega) = \sum_{m_1=-n_1}^{n_1} D_{mm_1}^{n_1}(\omega_1) D_{m_1M}^{n_1}(-\gamma_k, -\beta_k, -\alpha_k), \quad (2)$$

$$D_{mM}^{n_2}(\omega') = \sum_{m_2=-n_2}^{n_2} D_{mm_2}^{n_2}(\omega_2) D_{m_2M}^{n_2}(-\gamma_k, -\beta_k, -\alpha_k). \quad (3)$$

Подставляя (2) и (3) в (1) и используя свойство D -функций

$$D_{mM}^n(-\gamma, -\beta, -\alpha) = D_{Mm}^{n*}(\alpha, \beta, \gamma),$$

получим

$$V_{12}(R, \omega_1, \omega_2, \omega_R) = \sum W_{n_1 n_2}^{m M' M''}(R) \times \\ \times D_{mm_1}^{n_1}(\omega_1) D_{mm_2}^{n_2}(\omega_2) D_{M'M_1}^{n_1}(\omega_R) D_{M''M_2}^{n_2}(\omega_R). \quad (4)$$

Разложение (4) представляет собой парную энергию взаимодействия нелинейных молекул, зависящую от относительной ориентации молекул и сферических углов вектора R ($\omega_k = \Omega_R$) в лабораторной системе координат. Учитывая, что в одноосном жидком кристалле имеет место свободное вращение относительно длинных осей молекул, выражение (4) можно упростить. Для этого направим оси z и z' молекулярно-неподвижных систем координат вдоль длинных осей молекул и усредним $V_{12}(R, \omega_1, \omega_2, \omega_R)$ по эйлеровым углам γ_1, γ_2 :

$$\bar{V} = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} V_{12} d\gamma_1 d\gamma_2 / 4\pi^2. \quad (5)$$

Подставляя (4) в (5) и используя равенства (см., например, [2])

$$\int_0^{2\pi} D_{mm_1}^n(\alpha, \beta, \gamma) d\gamma = 2\pi D_{m0}^n(\alpha, \beta, 0) \delta_{m_1, 0},$$

$$D_{m0}^n(\alpha, \beta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}} \cdot Y_{nm}(\beta, \alpha) \quad (\beta = \theta, \alpha = \varphi),$$

получим

$$\bar{V}_{12} = \sum_{n_1 n_2 m} \sum_{M' M''} \frac{(4\pi)^2}{(2n_1+1)(2n_2+1)} \cdot \bar{W}_{n_1 n_2 m}^{M' M''}(R) \times$$

$$\times Y_{n_1 m}(\Omega_1) \cdot Y_{n_2 m}(\Omega_2) \cdot Y_{n_1 M'}(\Omega_R) \cdot Y_{n_2 M'}(\Omega_R). \quad (6)$$

В случае аксиально-симметричных молекул потенциал межмолекулярного взаимодействия можно представить в виде разложения

$$V_{aa'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \sum_{l_1 l_2 j} U_{l_1 l_2 j}(R) T_{l_1 l_2 j}(\Omega_a, \Omega_{a'}, \Omega_R), \quad (7)$$

где $U_{l_1 l_2 j}$ — функции, зависящие только от расстояния между центрами тяжести молекул, $T_{l_1 l_2 j}$ — вращательные инварианты [3]:

$$T_{l_1 l_2 j} = i^{l_1 - l_2 - j} \sum_{m_1 m_2 m} \begin{pmatrix} l_1 l_2 j \\ m_1 m_2 m \end{pmatrix} D_{m_1 0}^{l_1}(\Omega_a) D_{m_2 0}^{l_2}(\Omega_{a'}) D_{m 0}^{l_2}(\Omega_R), \quad (8)$$

выражение в круглых скобках — «3j»-символ; $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$, $l_1, l_2 = 0, 2, 4, \dots$, суммирование по j производится по целым числам, удовлетворяющим условию треугольника: $|l_1 - l_2| \leq l_1 + l_2$. В случае centrosимметричных молекул отсутствуют слагаемые с нечетным j , характерные для хиральных молекул, образующих холестерический жидкий кристалл.

Использование в (6) разложения Клебша-Гордона

$$Y_{n_1 m_1}(\Omega) Y_{n_2 m_2}(\Omega) = \sum_{LM} (-1)^M \left[\frac{(2n_1 + 1)(2n_2 + 1)(2L + 1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} n_1 n_2 L \\ 0 0 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} n_1 n_2 L \\ m_1 m_2 -M \end{pmatrix} Y_{LM}(\Omega)$$

и сравнение формул (6) и (7) приводит к

$$V_{12}(R, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_R) = \sum_{l_1 l_2 j} U_{l_1 l_2 j}(R) \cdot T_{l_1 l_2 j}(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_R). \quad (9)$$

Входящие в (9) коэффициенты $U_{l_1 l_2 j}$ равны

$$U_{l_1 l_2 j}(R) = (2j + 1) \sum_{m, M = -l_2}^{l_2} (-1)^{m+M} \begin{pmatrix} l_1 l_2 j \\ m - m 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 l_2 j \\ 0 0 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 l_2 j \\ M - M 0 \end{pmatrix} \cdot \bar{W}_{l_1 l_2}^{m, M, M}(R); \quad (10)$$

где

$$\bar{W}_{l_1 l_2}^{m, M, M}(R) = \sum_{s, k, l} e_{kl}^s B_{l_1 l_2}^{(s)m}(R, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_e) Y_{l_1 M}^*(\theta_k) Y_{l_2 M}(\theta_l, 0), \quad l_2 = \min(l_1, l_2).$$

Примем, что взаимодействие атомов описывается обычным потенциалом Ленарда-Джонса с $S_1 = 12$, $S_2 = 6$; электростатическое взаимодействие остаточных зарядов атомов учитывать не будем. Из-за эквивалентности в НЖК ориентаций $\mathbf{a}$ и $-\mathbf{a}$ сохраним в разложении (9) только члены с четными индексами l_1, l_2 . Индекс j также принимает четные значения — из-за присутствия в (7) «3j»-символа $\begin{pmatrix} l_1 l_2 j \\ 0 0 0 \end{pmatrix}$.

Ограничимся в (9) членами с $l_1, l_2 \leq 2$ ($j \leq 4$).

В этом приближении V_{12} является суммой слагаемых с коэффи-

циентами $U_{000}, U_{220}, U_{022}, U_{202}, U_{222}, U_{224}$. Последние четыре коэффициента, согласно результатам теории, развитой в [4], играют существенную роль при расчете упругих свойств жидкого кристалла. Поэтому, если рассматривать недерформированный кристалл, то для V_{12} можно ограничиться только первыми двумя членами:

$$V_{12} = U_0(R) + U_2(R) \cdot P_2(\cos \gamma). \quad (11)$$

Здесь $U_0(R) = U_{000}(R)$ — изотропное слагаемое, $U_2(R) = \frac{1}{\sqrt{5}} U_{220}(R)$ — функция, являющаяся аналогом соответствующего параметра потенциала Майера-Заупе [5].

Для вычисления функций $U_0(R)$ и $U_2(R)$ по данной методике расчета необходимо знание сферических координат атомов ПАА относительно центра масс молекулы. В работе [6] показано строение молекулы ПАА. Она состоит из 33-х атомов четырех сортов — Н, С, О и N. Значения относительных декартовых координат атомов также приведены в [6].

Центр масс молекулы, вычисленный по формуле

$$R_{cm} = \frac{\sum_k m_k r_{k\mu}}{\sum_k m_k}, \quad \mu = x, y, z,$$

где m_k — масса, а μ — координата атома k , который находится на расстоянии 0,580 Å от атома N(10). Направление молекулярной оси z выбрано от центра масс к атому С(1). При этом атом Н(31) с большой точностью лежит на той же оси.

Сферические координаты атомов относительно молекулярно неподвижной системы, рассчитанные по их декартовым координатам, приведены в [7]. Константы взаимодействия между атомами Н...Н, Н...С и т. д. (всего 20 констант) взяты из работы [8].

Найдем равновесное расстояние R_0 между центрами тяжести молекул ПАА при их параллельной ориентации ($j=0$). Минимальное по R значение функции V_{12} может быть учтено с помощью необходимого условия минимума функции V_{12} :

$$\left(\frac{\partial V_{12}}{\partial R} \right)_{R=R_0} = 0. \quad (12)$$

Расчеты на ЭВМ с использованием формулы (9), данных работы [8] и таблицы из [7] приводят к значению $R_0 = 7,382$ Å. Найденное число примерно соответствует среднему расстоянию между соседними молекулами, полученному из рентгеновских исследований плотной упаковки молекул ПАА в мезоморфном состоянии [9].

Расчеты функций $U_0(R)$ и $U_2(R)$ при $R=R_0$ приводят к значениям $U_0(R_0) = -7,82$ ккал/моль и $U_2(R_0) = -0,80$ ккал/моль. Эти цифры показывают, что на равновесном расстоянии R_0 как изотропная, так и анизотропная составляющие парной энергии молекул ПАА несут

характер приращения. Кроме того, вклад в энергию анизотропного взаимодействия составляет не более 10% от энергии изотропного взаимодействия молекул.

Полученные результаты интересно сравнить с неэмпирическими (квантомеханическими) расчетами для ПАА. В [10] на основе метода возмущений Релея—Шредингера вычислены энергии электростатического, индукционного, дисперсионного взаимодействий. Для вычислений энергии обменного отталкивания использовалась отталкивающая часть потенциалов Ленарда-Джонса и Букингема. Глубина потенциальной ямы получается $\approx -3,4$ ккал/моль, параллельное смещение второй молекулы относительно первой по выбранной локальной оси z равно 6 Å. Более детальные расчеты, проведенные в [11], приводят к тому, что при взаимодействии молекул в одной плоскости энергия равняется $-3,07$ ккал/моль, а при межплоскостном взаимодействии $-14,43$ ккал/моль. Имеется также разница энергий между параллельными и антипараллельными расположениями молекул (порядка 1—1,5 ккал/моль).

Таким образом, сравнение с экспериментальными данными и неэмпирическими расчетами показывает, что предложенная методика нахождения парной энергии удлинённых осесимметричных молекул в приближении ААП вполне пригодна для количественных оценок. В дальнейшем этот подход может быть развит и усовершенствован путем учета дополнительных членов ряда (9), энергии электростатического взаимодействия, уточнения констант взаимодействия ААП и т. п.

В заключение, используя полученные данные, оценим температуру потери устойчивости изотропной фазы ПАА в приближении самогласованного поля по формуле [12]

$$T_c^* = \frac{c \cdot |\bar{U}_2(0)|}{5k},$$

где k — постоянная Больцмана, $\bar{U}_2(0) = \sum_k U_2(R)$, c — концентрация молекул. В приближении взаимодействия ближайших соседей $\bar{U}_2(0) \approx Z \cdot U_2(R_0)$, где Z — число ближайших соседей. Если жидкий кристалл описывается простой кубической решеткой, то $Z \sim 6$. Принимая также $c = 0,95$ (см. [13]), получаем $T_c^* \approx 460$ К. Экспериментальное значение точки просветления ПАА ~ 408 К.

Авторы благодарят А. А. Мурадяна за помощь при выполнении численных расчетов.

Работа выполнена в рамках научных тем, финансируемых централизованными государственными источниками под кодом 94-171.

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Бадалян, Р. М. Абрамян. Изв. НАН Армении, Физика, 32, 167 (1997).
2. Д. А. Варшалович, Л. Н. Москалев, В. К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Л., Наука, 1975.

3. A. J. Stone. Mol. Phys., 36, № 1, 241 (1978).
4. Д. А. Бадалян, Л. Г. Карамян. УФЖ. 38, №5, 726(1993).
5. W. Maier, A. Saure. Zs. Naturforsch, 13a, 564 (1958); 14a, 882 (1959); 15a, 287 (1960).
6. W. R. Krigbaum, Y. Chatani, P. J. Varber. Acta Crystallogr., B26, 97 (1970).
7. Д. А. Бадалян, Докт. диссертация. Ереван, 1993.
8. В. К. Першин, С. А. Скопинов. Кристаллография, 26, 1(1981).
9. И. Г. Чистяков, З. Б. Раджабова. В кн. «Физические методы исследования твердого тела», вып. 3, Свердловск, с. 68, 1979.
10. J. W. Vagan, A. Les. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 54, 273 (1979).
11. N. K. Sanyal, S. N. Tiwary, M. Roychoudhury. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 140, 179 (1986).
12. D. A. Badalyan, A. G. Khachaturyan, J. Phys. Chem. Solids, 39, 711 (1978).
13. Д. А. Бадалян, А. А. Мурадян. УФЖ, 35, 696 (1990).

ԱՏՈՄ-ԱՏՈՄ ՊՈՏՆԵՑԻԱԼՆԵՐԻ ԿԻՐԱՌՈՒԹՅՈՒՆԸ ՊԼԱՍՏԻԿ ԵՎ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՊՏՏԱԿԱՆ ՖԱԶԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐԵԼԻՍ, II. ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐ

Գ. Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ռ. Մ. ԱՐԱՀԱՄՅԱՆ

Առաջարկված է մեղրոգն մոլեկուլների զույգային փոխազդեցության էներգիայի հաշվման մեթոդ, որը հիմնված է ատոմ-ատոմային մոտավորությամբ մոլեկուլների պոտենցիալի՝ ըստ սֆերիկ ֆունկցիաների երկկենտրոն վերլուծության վրա: Որպես կիրառություն օրինակ դատարկված է p-ազոկսիանիզոլի երկու մոլեկուլների փոխազդեցությունը: Այդ նյութի համար հաշված է կայունության կորստի շեմաստիճանը՝ նեմատիկ հեղուկ բյուրեղ-իզոտրոպ հեղուկ ֆազային անցման ժամանակ:

APPLICATION OF ATOM-ATOM POTENTIALS IN INVESTIGATION OF ROTATIVE PHASE TRANSITIONS IN PLASTIC AND LIQUID CRYSTALS. II. LIQUID CRYSTALS

D. H. BADALYAN, R. M. ABRAHAMIAN

A calculation method is proposed for the couple energy of mesogen molecules' interaction, based on the bipolar expansion of molecules' potential in the atom-atom approximation in spheric functions. As an example, the interaction of two paraazoxyanizol molecules is considered. The temperature of the stability loss of the phase transition nematic liquid crystal—isotropic liquid is calculated for this matter.

АСИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ ТРЕХУРОВНЕВЫХ АТОМОВ
В ПОЛЕ ДВУХ СТОЯЧИХ ВОЛН

А. М. ИШХАНИЯ

Инженерный центр НАН Армении

(Поступила в редакцию 15 ноября 1996 г.)

Проведен анализ особенностей аномального когерентного рассеяния трехуровневых атомов в поле стоячих волн. Показано, что в аномальном режиме рассеяния, реализующемся в сильных полях, происходят качественные изменения картины дифракции (появляется асимметрия и происходит частичное пленение населенностей), которые следует учитывать при выборе эффективных схем атомной селекции и расщепления пучков.

1. В экспериментах [1, 2] по рассеянию тепловых атомов натрия в сильном резонансном поле стоячей волны обнаружались неожиданные аномалии, противоречащие установившимся теоретическим представлениям [3, 4] когерентного рассеяния атомов в поле стоячей световой волны: асимметричность диаграммы распределения рассеянных атомов по импульсам и осцилляционный характер частотной зависимости амплитуды рассеяния.

Экспериментально было установлено, что данные эффекты проявляются только в сильных полях и что осцилляции амплитуды и асимметрии диаграммы рассеяния происходят с одинаковой характерной частотой, не являющейся функцией ни напряженности поля, ни угла наблюдения [1, 2]. Был получен довольно неожиданный результат: период осцилляций определяется расстоянием L между атомным пучком и отражающим зеркалом, т. е. определяется задержкой между падающей и отраженной от зеркала волнами (в данном эксперименте рассеивающая стоячая волна создавалась двумя встречными импульсами бегущих волн: падающим и отраженным от зеркала).

Принципиальное объяснение указанных аномалий было дано на базе модели двухуровневого атома в работах [5—7], где было показано, что характер дифракции на стоячей волне существенным образом зависит от начального состояния атомов: для оптико-механически смешанных начальных состояний, для которых основной и возбужденный уровни отличаются по импульсу, дифракция происходит асимметрично [5] и осцилляционно [6—7].

Исходя из того обстоятельства, что время задержки $2L/c$ соответствует времени, когда на атом действует лишь падающая бегущая волна, в работе [5] была выдвинута гипотеза, что возможной причиной наблюдавшихся в рассматриваемом эксперименте [1, 2] особенностей является состояние атома в момент установления стоячей вол-

ны, обусловленное предварительным возбуждением атомов падающей бегущей волной. Было показано, что, действительно, при предварительном взаимодействии с бегущей волной (при условии резкого включения взаимодействия) атом оказывается в вышеуказанном специфическом смешанном состоянии. Таким образом, в работах [5—7] была предложена модельная теория аномального рассеяния в поле стоячей волны для двухуровневых атомов.

В настоящей работе мы рассматриваем особенности аномального рассеяния атомов в трехуровневом случае. Следует сказать, что трехуровневая модель в последнее время привлекает большое внимание в связи с разнообразными возможными приложениями в квантовой оптике и в атомной интерферометрии. В частности, эффективное вовлечение во взаимодействие со внешним полем трех атомных уровней открывает большие возможности для создания эффективных расщепителей и отражателей пучков (см., например, [8—10]), а также для достижения сверхнизких температур применением когерентной скоростной селекции [11].

Ниже мы рассмотрим аномальную дифракцию трехуровневых атомов в поле бихроматической стоячей волны при условии предварительного возбуждения атомов бегущими волнами. Как мы убедимся, в аномальном режиме, реализующемся в сильных полях, в картине рассеяния возникает сильная асимметрия, которую следует принимать в расчет при выборе эффективных схем для атомной селекции и расщепления пучков.

2. В отсутствие спонтанной релаксации динамика трехуровневого атома в поле двух стоячих волн $E_s = E_{10} \cos(k_1 z) \exp(-i\omega_1 t + \psi_1) + E_{20} \cos(k_2 z) \exp(-i\omega_2 t + \psi_2) + \text{к.с.}$ описывается (в приближении вращающейся волны) нестационарными уравнениями Шредингера для амплитуд населенностей уровней $a_{1,2,3}$:

$$i a_{1t} = \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_1 + 2U_{10} \cos(k_1 z) e^{-i\Delta_1 t} a_2,$$

$$i a_{2t} = \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_2 + 2U_{10} \cos(k_1 z) e^{+i\Delta_1 t} a_1 + 2U_{20} \cos(k_2 z) e^{-i\Delta_2 t} a_3, \quad (1)$$

$$i a_{3t} = \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_3 + 2U_{20} \cos(k_2 z) e^{+i\Delta_2 t} a_2,$$

где $\hat{p}$ —оператор кинетической энергии, M —масса атома, $\Delta_{1,2}$ —расстройки волн от резонанса, $U_{10} = -d_{12} E_{10} / (2\hbar)$, $U_{20} = -d_{23} E_{20} / (2\hbar)$, d_{12} , d_{23} —матричные элементы соответствующих переходов.

Ограничимся рассмотрением задачи в приближении малых времен взаимодействия, когда можно считать атом покоящимся и пренебречь действием оператора кинетической энергии ($k v \tau_s \ll 1$, $(k \tau_s)^2 U_0 \hbar / M \ll 1$, v —проекция скорости атома на k , τ_s —время взаимодействия [3,4].

В случае точного резонанса $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ решение (1) имеет вид (для простоты предположим, что $U_{10} = U_{20} = U_0$, $k_1 \approx k_2 = k$ и $\psi_1 = \psi_2 = 0$)

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} + (z) + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} \right], \\ a_2 &= A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz}, \\ a_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} - B(z) + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} \right], \end{aligned} \quad (2)$$

где функции $A(z)$, $B(z)$ и $C(z)$ определяются начальными условиями.

Отметим, что в работе [10] рассмотрены различные режимы рассеяния трехуровневых атомов в поле бихроматической стоячей волны при условии, что в начальный момент волновой пакет атома в импульсном пространстве имеет только один максимум атомной плотности: $A = a\delta(p_0)$, $B = \beta\delta(p_0)$, $C = \gamma\delta(p_0)$, $a, \beta, \gamma = \text{const}$. Во всех случаях рассеяние происходит симметрично по отношению к направлению первоначального импульса атома p_0 .

Рассмотрим случай, когда атом приготавливается воздействием двух бегущих волн, распространяющихся в одинаковом направлении: $E_r = (E_{10}/2)\exp(-i\omega_1 t - ik_1 z + \psi_1) + (E_{20}/2)\exp(-i\omega_2 t - ik_2 z + \psi_2) + \text{к.с.}$

Соответствующая трехуровневая задача

$$\begin{aligned} ia_{1t} &= U_0 e^{-i\Delta t - ikz} a_2, \\ ia_{2t} &= U_0 e^{i\Delta t + ikz} a_1 + U_0 e^{-\Delta t - ikz} a_3, \\ ia_{3t} &= U_0 e^{i\Delta t + ikz} a_2 \end{aligned} \quad (3)$$

(где вновь считается, что $U_{10} = U_{20} = U_0$, $k_1 \approx k_2 = k$ и $\psi_1 = \psi_2 = 0$) при точном резонансе, как нетрудно убедиться имеет решение (предполагается быстрое включение бегущей волны)

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2} \left[1 + \cos(\sqrt{2}U_0 t) \right] \varphi(z) = a(t)\varphi(z), \\ a_2 &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sin(\sqrt{2}U_0 t) e^{ikz} \varphi(z) = \beta(t) e^{ikz} \varphi(z), \\ a_3 &= \frac{1}{2} \left[-1 + \cos(\sqrt{2}U_0 t) \right] e^{2ikz} \varphi(z) = \gamma(t) e^{2ikz} \varphi(z), \end{aligned} \quad (4)$$

где предположено, что перед взаимодействием с бегущими волнами атом находился в основном состоянии (здесь функция $\varphi(z)$ задает первоначальное распределение атомной плотности в импульсном пространстве).

В соответствии с этим, начальные условия задачи рассеяния атомов на стоячих волнах (т.е. амплитуды населенностей атомных уровней в конце интервала взаимодействия с бегущими волнами) имеют вид

$$a_1 = a(\tau_r)\varphi(z), \quad a_2 = \beta(\tau_r)e^{ikz}\varphi(z), \quad a_3 = \gamma(\tau_r)e^{2ikz}\varphi(z), \quad (5)$$

ны, обусловленное предварительным возбуждением атомов падающей бегущей волной. Было показано, что, действительно, при предварительном взаимодействии с бегущей волной (при условии резкого включения взаимодействия) атом оказывается в вышеуказанном специфическом смешанном состоянии. Таким образом, в работах [5—7] была предложена модельная теория аномального рассеяния в поле стоячей волны для двухуровневых атомов.

В настоящей работе мы рассматриваем особенности аномального рассеяния атомов в трехуровневом случае. Следует сказать, что трехуровневая модель в последнее время привлекает большое внимание в связи с разнообразными возможными приложениями в квантовой оптике и в атомной интерферометрии. В частности, эффективное вовлечение во взаимодействие со внешним полем трех атомных уровней открывает большие возможности для создания эффективных расщепителей и отражателей пучков (см., например, [8—10]), а также для достижения сверхнизких температур применением когерентной скоростной селекции [11].

Ниже мы рассмотрим аномальную дифракцию трехуровневых атомов в поле бихроматической стоячей волны при условии предварительного возбуждения атомов бегущими волнами. Как мы убедимся, в аномальном режиме, реализующемся в сильных полях, в картине рассеяния возникает сильная асимметрия, которую следует принимать в расчет при выборе эффективных схем для атомной селекции и расщепления пучков.

2. В отсутствие спонтанной релаксации динамика трехуровневого атома в поле двух стоячих волн $E_s = E_{10} \cos(k_1 z) \exp(-i\omega_1 t + \psi_1) + E_{20} \cos(k_2 z) \exp(-i\omega_2 t + \psi_2) + \text{к.с.}$ описывается (в приближении вращающейся волны) нестационарными уравнениями Шредингера для амплитуд населенностей уровней $a_{1,2,3}$:

$$\begin{aligned} ia_{1t} &= \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_1 + 2U_{10} \cos(k_1 z) e^{-i\Delta_{1t} t} a_2, \\ ia_{2t} &= \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_2 + 2U_{10} \cos(k_1 z) e^{+i\Delta_{1t} t} a_1 + 2U_{20} \cos(k_2 z) e^{-i\Delta_{2t} t} a_3, \\ ia_{3t} &= \frac{\hat{p}^2}{2M\hbar} a_3 + 2U_{20} \cos(k_2 z) e^{+i\Delta_{2t} t} a_2, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\hat{p}$ —оператор кинетической энергии, M —масса атома, $\Delta_{1,2}$ —расстройка волн от резонанса, $U_{10} = -d_{12} E_{10} / (2\hbar)$, $U_{20} = -d_{23} E_{20} / (2\hbar)$, d_{12} , d_{23} —матричные элементы соответствующих переходов.

Ограничимся рассмотрением задачи в приближении малых времен взаимодействия, когда можно считать атом покоящимся и пренебречь действием оператора кинетической энергии ($k v \tau_s \ll 1$, $(k \tau_s)^2 U_0 \hbar / M \ll 1$, v —проекция скорости атома на k , τ_s —время взаимодействия [3,4].

В случае точного резонанса $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ решение (1) имеет вид (для простоты предположим, что $U_{10} = U_{20} = U_0$, $k_1 \approx k_2 = k$ и $\psi_1 - \psi_2 = 0$)

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} + (z) + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} \right], \\ a_2 &= A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz}, \\ a_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-A(z)e^{2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} - B(z) + C(z)e^{-2i\sqrt{2}U_0t \cos kz} \right], \end{aligned} \quad (2)$$

где функции $A(z)$, $B(z)$ и $C(z)$ определяются начальными условиями.

Отметим, что в работе [10] рассмотрены различные режимы рассеяния трехуровневых атомов в поле бихроматической стоячей волны при условии, что в начальный момент волновой пакет атома в импульсном пространстве имеет только один максимум атомной плотности: $A = \alpha \delta(p_0)$, $B = \beta \delta(p_0)$, $C = \gamma \delta(p_0)$, $\alpha, \beta, \gamma = \text{const}$. Во всех случаях рассеяние происходит симметрично по отношению к направлению первоначального импульса атома p_0 .

Рассмотрим случай, когда атом готовится воздействием двух бегущих волн, распространяющихся в одинаковом направлении: $E_r = (E_{10}/2)\exp(-i\omega_1 t - ik_1 z + \psi_1) + (E_{20}/2)\exp(-i\omega_2 t - ik_2 z + \psi_2) + \text{к.с.}$

Соответствующая трехуровневая задача

$$\begin{aligned} ia_{1t} &= U_0 e^{-i\Delta t - ikz} a_2, \\ ia_{2t} &= U_0 e^{i\Delta t + ikz} a_1 + U_0 e^{-\Delta t - ikz} a_3, \\ ia_{3t} &= U_0 e^{i\Delta t + ikz} a_2 \end{aligned} \quad (3)$$

(где вновь считается, что $U_{10} = U_{20} = U_0$, $k_1 \approx k_2 = k$ и $\psi_1 - \psi_2 = 0$) при точном резонансе, как нетрудно убедиться имеет решение (предполагается быстрое включение бегущей волны)

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2} \left[1 + \cos(\sqrt{2}U_0 t) \right] \varphi(z) = a(t)\varphi(z), \\ a_2 &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sin(\sqrt{2}U_0 t) e^{ikz} \varphi(z) = \beta(t) e^{ikz} \varphi(z), \\ a_3 &= \frac{1}{2} \left[-1 + \cos(\sqrt{2}U_0 t) \right] e^{2ikz} \varphi(z) = \gamma(t) e^{2ikz} \varphi(z), \end{aligned} \quad (4)$$

где предположено, что перед взаимодействием с бегущими волнами атом находился в основном состоянии (здесь функция $\varphi(z)$ задает первоначальное распределение атомной плотности в импульсном пространстве).

В соответствии с этим, начальные условия задачи рассеяния атомов на стоячих волнах (т.е. амплитуды населенностей атомных уровней в конце интервала взаимодействия с бегущими волнами) имеют вид

$$a_1 = a(\tau_r)\varphi(z), \quad a_2 = \beta(\tau_r)e^{ikz}\varphi(z), \quad a_3 = \gamma(\tau_r)e^{2ikz}\varphi(z), \quad (5)$$

где τ_r — время взаимодействия с бегущей волной.

Как видим, предварительное воздействие на атом бегущих волн приводит к образованию оптико-механически смешанного состояния, когда основное и возбужденные состояния отличаются по импульсу. Если $\varphi(z)$ задает один пик, то в данном конкретном случае волновой пакет атома перед рассеянием на стоячих волнах имеет три пика атомной плотности, соответствующих импульсам p_0 , $p_0 + \hbar k$, $p_0 + 2\hbar k$.

С учетом (5) для функций $A(z)$, $B(z)$ и $C(z)$ получаем

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \left[\beta e^{ikz} - \frac{1}{\sqrt{2}} (a + \gamma e^{2ikz}) \right] \varphi(z), \\ B &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a - \gamma e^{2ikz}) \varphi(z), \\ C &= \frac{1}{2} \left[\beta e^{ikz} + \frac{1}{\sqrt{2}} (a + \gamma e^{2ikz}) \right] \varphi(z). \end{aligned} \quad (6)$$

Вернемся теперь к решению (2) исходной задачи рассеяния на стоячих волнах. Переходя к импульсному представлению и учитывая разложение экспоненты по функциям Бесселя

$$e^{\pm i x \cos \theta} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (\pm i)^n J_n(x) e^{in\theta},$$

имеем:

$$\begin{aligned} a_{1,3} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n J_n(2\sqrt{2} U_0 t) \int_{-\infty}^{+\infty} [-A + (-1)^n C] e^{-i(p-n\hbar k)z/\hbar} dz \pm \\ &\quad \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} B e^{-ipz/\hbar} dz, \\ a_2 &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n J_n(2\sqrt{2} U_0 t) \int_{-\infty}^{+\infty} [A + (-1)^n C] e^{-i(p-n\hbar k)z/\hbar} dz. \end{aligned} \quad (7)$$

Если перед взаимодействием с бегущей волной атом имел точно определенный импульс:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(z) e^{-ipz/\hbar} dz = \delta(p - p_0),$$

то, подставив выражения (6) в (7), окончательно получаем

$$a_{1,3} = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n \left[\frac{+1 + (-1)^n}{2} \right] [a J_n + i\sqrt{2} \beta J_{n-1} - \gamma J_{n-2}] \cdot \delta(n) \pm \frac{1}{2} \{a \delta(0) - \gamma \delta(2)\}, \quad (9)$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n \left[\frac{-1 + (-1)^n}{2} \right] |aJ_n + i\sqrt{3}\beta J_{n-1} - \gamma J_{n-2}| \cdot \delta(n),$$

где $J_n = J_n(2\sqrt{2}U_0t)$, $\delta(n) = \delta(p - p_0 - n\hbar k)$.

Обратим внимание, что отличительной чертой рассеяния в трехуровневом случае является то, что имеет место определенное пленение населенностей. А именно, половина первоначальной населенности уровней 1 и 3 не рассеивается стоячими волнами. Об этом свидетельствует слагаемое в фигурных скобках в полученных выражениях для $a_{1,3}$. Нетрудно показать (см. содержащий $B(z)$ интеграл в (7)), что в общем случае число не испытывающих рассеяние атомов задается выражением $W_{\text{вс}} = \sum_n |a_1^0(n) - a_3^0(n)|^2 / 2$, где $a_1^0(n)$ и $a_3^0(n)$ — амплитуды населенностей состояний с трансляционным числом n уровней 1 и 3 в начальный момент установления стоячих волн.

Из соотношений (9) видно также, что вследствие смещения в начальных условиях (5) внутренних и трансляционных степеней свободы, при дифракции на стоячих волнах трехуровневых атомов, как и в двухуровневом случае [5], происходит вторичная интерференция в импульсном пространстве амплитуд населенностей уровней (т.е. наложение трех наборов вторичных пиков $\{J_n\}$, $\{J_{n-1}\}$ и $\{J_{n-2}\}$, расщепленных от трех первичных пиков атомного волнового пакета).

Покажем, что вследствие указанной интерференции в картине рассеяния возникает сильная асимметрия (в отличие от решения [8], не учитывающего, как отмечалось, начального перемешивания оптико-механических степеней свободы атома).

Действительно, поскольку выражение для $a_{1,3}$ содержит только четные порядки, а для a_2 — нечетные, то вероятность приобрести атому импульс $n\hbar k$ в момент времени t есть:

$$W_0 = \frac{1}{2} |xJ_0 + i\sqrt{2}\beta J_{-1} - \gamma J_{-2}|^2 + \frac{x^2}{2},$$

$$W_2 = \frac{1}{2} |xJ_2 + i\sqrt{2}\beta J_1 - \gamma J_0|^2 + \frac{\gamma^2}{2}, \quad (10)$$

$$W_n = \frac{1}{2} |xJ_n + i\sqrt{2}\beta J_{n-1} - \gamma J_{n-2}|^2, \quad n \neq 0, 2.$$

Отсюда, с учетом равенства $J_{-n} = (-1)^n J_n$ имеем ($N > 0$):

$$W_{+N} = \frac{1}{2} |xJ_N + i\sqrt{2}\beta J_{N-1} - \gamma J_{N-2}|^2 + \frac{\gamma^2}{2} \delta_{N2}, \quad (11)$$

$$W_{-N} = \frac{1}{2} |xJ_N - i\sqrt{2}\beta J_{N+1} - \gamma J_{N+2}|^2,$$

где δ_{N2} — символ Кронекера.

Таким образом, $W_{+N} \neq W_{-N}$. Асимметрия диаграммы рассеяния (за вычетом плененной населенности) при больших временах взаимодей-

ствия со стоячими волнами ($U_0 t \gg 1$), как легко можно показать, дается выражением

$$\Delta W^{\pm}(t) = \sum_{N=1}^{+\infty} (W_{+N} - W_{-N}) - \frac{\gamma^2}{2} \approx i\sqrt{2}\beta(\alpha - \gamma) \cdot C_0, \quad (12)$$

где $C_0 = \int_0^{u=2\sqrt{2}U_0 t} (J_2^0(u) - J_1^2(u)) du \rightarrow 0.64$ при $U_0 t \rightarrow \infty$.

Видно, что асимметрия отсутствует в двух случаях: либо $\alpha - \gamma = 0$, либо $\beta = 0$. Так как при начальных условиях (4) $\alpha - \gamma = 1$, то асимметрия отсутствует только когда в начальный момент времени второй уровень не заселен: $\beta = -i \sin(\sqrt{2} U_0 \tau_r) / \sqrt{2} \Leftrightarrow \sqrt{2} U_0 \tau_r = \pi k$, $k=1, 2, \dots$. Однако в других физических ситуациях реализуемо также и условие $\alpha - \gamma = 0$. Например, это имеет место, когда атом предварительно взаимодействует только с одной бегущей волной, резонансной переходу $1 \rightarrow 2$, если при этом достигается полное опустошение первого уровня и вся атомная населенность оказывается на втором уровне.

Для начальных условий (4) имеем ($t \rightarrow \infty$):

$$\Delta W^{\pm} \approx C_0 \sin(\sqrt{2} U_0 \tau_r), \quad C_0 \approx 0.64. \quad (13)$$

Как видим, асимметрия диаграммы рассеяния является знакопеременной осциллирующей величиной. Частота осцилляций определяется (как и в двухуровневом случае) площадью огибающей бегущей волны $U_0 \tau_r$.

Несложные выкладки показывают, что средний обретенный атомом импульс отличен от нуля (заметим, что ненулевой средний обретенный импульс означает преломление атомного пучка в целом):

$$\langle p \rangle = \hbar k [2\gamma^2 + (i\beta)^2] + \hbar k \sqrt{2} U_0 \tau_s (\alpha - \gamma) (i\sqrt{2}\beta), \quad (14)$$

где τ_s — время взаимодействия со стоячей волной. Первое слагаемое полученного выражения обязано своим происхождением, очевидно, взаимодействию атома с бегущими волнами. Последнее же слагаемое является результатом воздействия стоячей волны. Отметим, что поскольку это слагаемое пропорционально амплитуде поля, то аномалии могут заметно проявиться только в сильных полях. При больших временах взаимодействия средний обретенный импульс может достигнуть значительных величин. Так как при начальных условиях (4)

$$\langle p \rangle \approx \hbar k \sqrt{2} U_0 \tau_s \cdot \sin(\sqrt{2} U_0 \tau_r),$$

то $\langle p \rangle_{\max} \approx p_{\max}$, где $p_{\max} = \hbar k \sqrt{2} U_0 \tau_s$ — максимальный обретенный атомом импульс. Следовательно, максимально возможный угол преломления атомного пучка как целого составляет примерно $p_{\max}/p_0$.

Таким образом, мы показали, что при предварительном возбуждении атомов бегущими волнами в дифракционной картине рассеяния трехуровневых атомов в сильном поле стоячих волн появляются опре-

деленные особенности: происходит частичное пленение населенностей на определенных (заселяемых вследствие взаимодействия с бегущими волнами) оптико-механически смешанных состояниях, а в диаграмме рассеяния возникает сильная асимметрия. Указанные особенности аномального рассеяния на сильных стоячих волнах следует корректно учитывать при выборе эффективных режимов атомной селекции или расщепления пучков по трехуровневой схеме при применении последовательных импульсов бегущих и стоячих волн, как, например, при образовании импульсных стоячих полей с помощью отражающих зеркал.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Гринчук, И. А. Гришина, Е. Ф. Кузин, М. Л. Нагаева, Г. А. Рябенко, В. П. Яковлев. Квантовая электроника, 21, 314 (1994).
2. G. A. Ryabenko, V. A. Grinchuk, I. A. Grishina, et al. Laser Physics, 6, 150 (1996).
3. А. П. Казанцев, Г. И. Сурдутович, В. П. Яковлев. Механическое действие света на атомы. М., Наука, 1991.
4. В. Г. Минюгин, В. С. Летохов. Давление лазерного излучения на атомы. М., Наука, 1986.
5. А. М. Ишханян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 3(1997).
6. А. М. Ишханян. Труды конф. «Лазерная физика-96». Аштарак, с. 90, 1996.
7. А. М. Ishkhanyan. Laser Physics, 1997 (в печати).
8. P. Marte, P. Zoller, J. L. Hall. Phys. Rev. A, 44, R4118 (1991).
9. S. Glasgow, P. Meystre, M. Wilkens, E. M. Wright. Phys. Rev. A, 43, 2455 (1991).
10. А. С. Пазгалев, Ю. В. Рождественский. ЖЭТФ, 109, 2005(1996).
11. Е. А. Корсунский, Д. В. Косачев, Б. Г. Матисов, Ю. В. Рождественский. ЖЭТФ, 10, 396(1993).

ԵՐԱՆԿԱՐԳԱԿ ԱՏՈՄՆԵՐԻ ԱՍԻՄԵՏՐԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԵՐԿՈՒ ԿԱՆԳՈՒՆ ԱՆՏՐՆԵՐԻ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա. Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Կատարված է կանգուն ալիքների դաշտում եռմակարդակ ատոմների անոմալ կոհերենտ գրման առանձնահատկությունների վերլուծություն: Ցույց է տրված, որ ուժեղ դաշտերում իրականացվող անոմալ գրման զեպրում դիֆրակցիոն պատկերում կատարվում են որակական փոփոխություններ (առաջանում է ասիմետրիա և տեղի է ունենում բնակեցվածությունների մասնակի զերում), որոնք պիտի հաշվի առնվեն ատոմների սելեկցիայի կամ սկոմական փնջերի բաժանման արդյունավետ սխեմաների ընտրման ժամանակ:

ASYMMETRIC DIFFRACTION OF THREE-LEVEL ATOMS IN THE FIELD OF TWO STANDING WAVES

A. M. ISHKHANYAN

The analysis of the peculiarities of the anomalous coherent scattering of three-level atoms in the field of standing waves is presented. It is shown that at the anomalous scattering (occurring in strong fields) the diffraction pattern undergoes qualitative changes (an asymmetry occurs and a partial inhibition trapping takes place) which would be taken into account when projecting effective schemes for atomic selection or beam-splitting.

УДК 621.373

НОВЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПРОСТЕЙШИМИ АТОМАМИ

М. Л. ТЕР-МИКАЕЛЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 17 апреля 1997г.)

В работе изложен новый метод исследования резонансного взаимодействия лазерного излучения с атомами. Метод основан на исследовании уравнения Шредингера в пространстве мнимого времени и использовании теории функций комплексного переменного для интегрирования системы линейных дифференциальных уравнений. В качестве примера рассмотрена четырехуровневая модельная атомная система, взаимодействующая с четырьмя резонансными полями. Найдена волновая функция системы «атом+поле», которая в случае точных резонансов имеет простой аналитический вид и может быть использована для вычисления целого ряда реакций (рассеяние и поглощение, генерация гармоник и т. д.)

1. Введение и постановка задачи

Рассмотрим взаимодействие четырехуровневых атомных систем, различные схемы которых представлены на рис. 1, с четырьмя лазерными излучениями, действующими вблизи резонансных переходов, напряженности которых определяются выражениями

$$E_m = e_m \varepsilon_m e^{i k_m r - i \omega_m t} + \text{к.с.}; \quad e_m^* = \varepsilon_m. \quad (1)$$

Указанные на рис. 1 схемы рассматривались в большом количестве публикаций как экспериментальных, так и теоретических (см., например, [1—5]), поскольку они представляют большой интерес для излучения нелинейных явлений в газовых средах, в частности, для генерации третьей гармоники. Однако во всех работах (кроме [3, 4]) предполагается, что одно из четырех полей является слабым. В настоящей работе это ограничение снято. Считается, что каждое поле взаимодействует только с двумя уровнями, частота перехода между которыми близка к соответствующей частоте оптического излучения. Мы будем пренебрегать спектральными ширинами оптических излучений, а также ширинами атомных уровней.

Уравнение Шредингера в электродипольном приближении

$$i\hbar \frac{d\Phi}{dt} = (\hat{H}_0 - \sum_{m=1}^4 \hat{d}_m E_m) \Phi \quad (2)$$

будем решать, разлагая Φ по собственным функциям невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$:

$$\Phi = \sum_{l=1}^4 a_l \Psi_l, \quad (3)$$

где Ψ_l есть решение уравнения (2) при $E_m=0$:

$$\Psi_l = u_l \exp(-iE_l t). \quad (4)$$

Энергия атомных уровней E_l измеряются в единицах сек^{-1} .

Рис. 1. Различные схемы четырехуровневых систем, взаимодействующих с четырьмя внешними излучениями. Приведены значения энергии уровней E_l и их четностей, а также частоты внешних излучений. Результаты анализа и выражения для волновых функций, полученные для схемы лестничного типа 1а, легко переносятся и на схемы 1б и 1в. Например, результаты для схемы «М»-типа получаются из приведенных в тексте формул заменой $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_3$ и $\omega_2 \rightarrow -\omega_2$.

Рассмотрим схему лестничного типа (рис. 1а). Оператор взаимодействия имеет вид

$$\hat{H}_{int} = -\hat{d}(E_1 + E_2 + E_3 + E_4). \quad (5)$$

Рассмотрим первое слагаемое в (5), которое связано с переходом $1 \leftrightarrow 2$. Матричный элемент перехода равен

$$\langle 2 | \hat{H}_{int} | 1 \rangle = d_{21} [\varepsilon_1 e^{i(E_{21} - \omega_1)t} + \varepsilon_1^* e^{i(E_{21} + \omega_1)t}], \quad (6)$$

где

$$E_{21} = E_2 - E_1. \quad (7)$$

В резонансном приближении

$$|\Delta_{i+1,i}| = |E_{i+1} - E_i - \omega_i| \ll \omega_i. \quad (8)$$

Благодаря условию (8) в операторе взаимодействия (5), после усреднения по «быстрому» времени $T \sim \frac{1}{\omega_i}$ нерезонансным членом можно пренебречь. Этому вопросу посвящено много исследований (см., например, [6—8]), и мы не будем специально останавливаться на нем. В этом случае оператор взаимодействия можно представить в виде

$$\langle 2 | H_{int} | 1 \rangle = V_{21} e^{i\Delta_{21}t}, \quad (9)$$

где

$$V_{21} = -\frac{d_{21}\varepsilon_1}{\hbar}. \quad (9')$$

Мы не будем предполагать, что d_{21} —вещественный вектор, т. е. энергетические уровни, между которыми происходят резонансные переходы, могут быть и вырожденными. Выбором различных комбинаций поляризаций внешних полей иногда удается осуществить схему, при которой в процессах излучения и поглощения участвуют только два определенных уровня с определенными квантовыми числами. Поскольку d есть эрмитов оператор, то, следовательно,

$$V_{12} = V_{21}^* \quad (10)$$

В случае, если, например, уровень 2 лежит ниже уровня 1, в матричных элементах (10) нужно произвести замену $\varepsilon \rightarrow \varepsilon^*$ и $\omega \rightarrow -\omega$, т. е. заменить поглощение на излучение. Эта процедура дает возможность перенести результаты, полученные для схемы лестничного типа, на все другие схемы четырехуровневых систем (см., например, рис. 1б, в).

Переход в конечное состояние на начальный уровень 1 по схеме $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ будет когерентным процессом. Возможны, конечно, переходы и на другой конечный уровень с той же энергией, но обладающий другими квантовыми числами по сравнению с начальным уровнем 1. Такие процессы будут некогерентными. В обоих случаях в схеме 1а происходит сложение трех частот:

$$\omega_4 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 \quad (11)$$

Помимо указанных процессов возможен, например, переход по схеме $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 3$ в конечное состояние с другой энергией. Этот процесс также некогерентен и приводит к появлению фотона с частотой

$$\omega_4 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 - E_{31} \quad (11')$$

Мы остановимся на рассмотрении когерентного процесса по схеме лестничного типа, поскольку результаты для всех других схем можно легко получить путем переобозначений.

2. Вычисление волновой функции системы «атом + поле»

Перейдем к математическому расчету волновой функции системы «атом + поле». Вместо коэффициентов разложения a_i , входящих в выражение (3), введем коэффициенты b_i :

$$b_1 = a_1; \quad b_2 = a_2 e^{-i\Delta_{21}t}; \quad b_3 = a_3 e^{-i\Delta_{31}t}; \quad b_4 = a_4 e^{-i\Delta_{41}t} \quad (12)$$

где

$$\Delta_{21} = E_{21} - \omega_1; \quad \Delta_{31} = E_{31} - \omega_1 - \omega_2; \quad \Delta_{41} = E_{41} - \omega_1 - \omega_2 - \omega_3; \quad \Delta_{11} = 0 \quad (13)$$

Уравнение Шредингера в резонансном приближении примет вид

$$\begin{aligned} i\dot{b}_1 &= V_{12}b_2 + V_{14}b_4, \\ i\dot{b}_2 &= \Delta_{21}b_2 + V_{21}b_1 + V_{23}b_3, \\ i\dot{b}_3 &= \Delta_{31}b_3 + V_{32}b_2 + V_{34}b_4, \\ i\dot{b}_4 &= \Delta_{41}b_4 + V_{43}b_3 + V_{41}b_1, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\dot{b}$ означает дифференцирование по времени.

Обычно решение уравнений (14) ищется в виде

$$b_i = B_i e^{-i\lambda t}. \quad (15)$$

Мы, однако, используем другой метод интегрирования системы линейных уравнений с постоянными коэффициентами, основанный на использовании методов теории функций комплексного переменного (см., например, [9]). Он значительно упрощает расчеты для нахождения решения уравнений (14) с заданными начальными условиями. Будем искать решение в виде

$$b_i = \sum_R f_i e^{z\tau}, \quad \tau = -it, \quad (16)$$

где f_i — рациональная функция комплексной переменной z . Символ $\sum_R$ означает, что необходимо вычислить сумму вычетов функции $b_i = \sum f_i e^{z\tau}$ относительно всех особых точек, расположенных на конечном расстоянии на комплексной плоскости. Подставляя (16) в (14), имеем

$$\begin{aligned} \sum_R [-z f_1 + V_{12} f_2 + V_{14} f_4] e^{z\tau} &= 0, \\ \sum_R [f_1 + (\Delta_{21} - z) f_2 + V_{23} f_3] e^{z\tau} &= 0, \\ \sum_R [V_{32} f_2 + (\Delta_{31} - z) f_3 + V_{34} f_4] e^{z\tau} &= 0, \\ \sum_R [V_{41} f_1 + V_{43} f_3 + (\Delta_{41} - z) f_4] e^{z\tau} &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Если приравнять выражения, входящие в каждую квадратную скобку, постоянным числам $-C_i$, то уравнения (17) будут заведомо выполняться, поскольку экспоненциальная функция вообще не имеет особых точек на комплексной плоскости z . В этом случае имеем:

$$\begin{aligned} -z f_1 + V_{12} f_2 + V_{14} f_4 &= -C_1, \\ f_1 + (\Delta_{21} - z) f_2 + V_{23} f_3 &= -C_2, \\ V_{32} f_2 + (\Delta_{31} - z) f_3 + V_{34} f_4 &= -C_3, \\ V_{41} f_1 + V_{43} f_3 + (\Delta_{41} - z) f_4 &= -C_4. \end{aligned} \quad (18)$$

Решение алгебраических уравнений (18) будем искать обычным образом, используя формулы Крамера

$$f_i^s = \frac{D_i^s(z)}{D(z)} e^{z\tau}, \quad (19)$$

где верхний индекс у f_i^s и D_i^s (а также нижний индекс s у волновых функций Φ_s , введенных ниже) будет указывать на определенный выбор начальных условий. Например, если $C_1 = 1$, $C_i = 0$ при $i = 2, 3, 4$, то это будет означать, что выбрано частное решение, при котором атом

при $t=0$ находился в состоянии Ψ_1 , т. е. $\Phi_1(t=0) = \Psi_1$. Можно также рассмотреть и такие начальные состояния, когда при $t=0$ атом не находится в чистом состоянии Ψ_i . Входящий в (19) детерминант D имеет вид

$$D(z) = \begin{vmatrix} -z & V_{12} & 0 & V_{14} \\ V_{21} & \Delta_{21} - z & V_{23} & 0 \\ 0 & V_{32} & \Delta_{31} - z & V_{34} \\ V_{41} & 0 & V_{43} & \Delta_{41} - z \end{vmatrix}, \quad (20)$$

является эрмитовым и имеет вещественные корни. Детерминанты $D_i(z)$ получаются из детерминанта (20), если i -ый столбец заменить на столбец из коэффициентов $-C_i$. Очевидно, что найденные решения (16), (19) удовлетворяют следующим начальным условиям:

$$f_i^s(t=\tau=0) = \sum_R \frac{D_i^s(z)}{D(z)} C_i^s. \quad (21)$$

Это следует из того, что сумма вычетов рациональной дроби относительно ее полюсов, лежащих на конечных расстояниях, равна коэффициенту при z^{-1} разложения рациональной дроби в окрестности бесконечно далекой точки.

Следовательно, используя (3), (12), (16), (19), (21), искомая волновая функция примет вид

$$\Phi_s = \sum_{i=1}^4 b_i^s e^{i\Delta_{i1}t} \Psi_i, \quad (22)$$

где

$$b_i^s = \sum_R \frac{D_i^s(z)}{D(z)} e^{-z_i t} = \sum_{z_i} \frac{D_i(z_i)}{\dot{D}(z=z_i)} e^{-z_i t}, \quad (22')$$

где $\sum_{z_i}$ означает сумму вычетов относительно всех особых точек z_i , а

$\dot{D}$ в данном случае означает дифференцирование по z , т. е. $\dot{D} = \frac{\partial D}{\partial z}$.

После нахождения b_i^s нужно перейти согласно (16) к переменной t и подставить в (22).

Рассмотрим случай, когда система в начальный момент находится в состоянии Ψ_1 . При этом

$$C_1=1; \quad C_{i \neq 1}=0. \quad (23)$$

Детерминанты D_i легко рассчитываются и имеют вид (в дальнейшем для упрощения написания формул индекс $s=1$ опускается):

$$D_1 = -(\Delta_{21} - z)(\Delta_{31} - z)(\Delta_{41} - z) + (\Delta_{21} - z)|V_{43}|^2 + (\Delta_{41} - z)|V_{32}|^2, \quad (24)$$

$$D_2 = V_{21}(\Delta_{41} - z)(\Delta_{21} - z) + V_{41}V_{23}V_{34} - V_{21}|V_{43}|^2, \quad (25)$$

$$D_3 = -V_{21}V_{32}(\Delta_{41} - z) - (\Delta_{21} - z)V_{41}V_{34}, \quad (26)$$

$$D_4 = V_{21} V_{32} V_{43} + V_{41}(\Delta_{21} - z)(\Delta_{31} - z) - V_{41}|V_{32}|^2, \quad (27)$$

$$D = z(z - \Delta_{21})(z - \Delta_{31})(z - \Delta_{41}) - z(z - \Delta_{21})|V_{43}|^2 - z(z - \Delta_{41})|V_{32}|^2 - (z - \Delta_{31})(z - \Delta_{41})|V_{21}|^2 - (z - \Delta_{21})(z - \Delta_{31})|V_{14}|^2 + |V_{21} V_{43} - V_{23} V_{41}|^2 \quad (28)$$

или

$$D = (z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4), \quad (28')$$

где z_i — вещественные корни уравнения $D=0$.

Используя выражения (22') — (28'), получим

$$b_i = \frac{D_i(z_1)e^{-itz_1}}{(z_1 - z_2)(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)} + \frac{D_i(z_2)e^{-itz_2}}{(z_2 - z_1)(z_2 - z_3)(z_2 - z_4)} + \frac{D_i(z_3)e^{-itz_3}}{(z_3 - z_1)(z_3 - z_2)(z_3 - z_4)} + \frac{D_i(z_4)e^{-itz_4}}{(z_4 - z_1)(z_4 - z_2)(z_4 - z_3)}. \quad (29)$$

Подставляя (29) в (22), получим волновую функцию Φ_1 , подчиняющуюся начальному условию $C_1=1$, $C_{2,3,4}=0$.

3. Исследование волновой функции в предельных случаях

Корни детерминанта четвертого порядка не имеют простых аналитических решений. Поэтому мы ограничимся исследованием корней детерминанта в двух предельных случаях, когда расстройками резонанса можно пренебречь по сравнению с V_{ik} и в обратном пределе. В первом случае уравнение $D=0$ сводится к биквадратному уравнению

$$z^4 - |V|^2 z^2 + |V_{12} V_{34} - V_{32} V_{41}|^2 = 0, \quad (30)$$

где

$$V^2 = |V_{12}|^2 + |V_{23}|^2 + |V_{34}|^2 + |V_{41}|^2, \quad (31)$$

решение которого дает четыре вещественных различных корня

$$z_i = \pm \sqrt{\frac{V^2}{2} \pm \sqrt{\frac{V^4}{4} - |V_{12} V_{34} - V_{32} V_{41}|^2}}, \quad (32)$$

если нижеприведенное равенство не выполняется:

$$|V_{12} V_{34} - V_{32} V_{41}| = |d_{12}^i d_{34}^k \varepsilon_1^{*i} \varepsilon_3^{*k} - d_{32}^i d_{41}^k \varepsilon_3^{*i} \varepsilon_4^{*k}| = 0. \quad (33)$$

(по повторяющимся индексам i и k производится суммирование). Поскольку корни уравнения не пересекаются, их будем нумеровать в порядке их возрастания: $z_1 < z_2 < z_3 < z_4$. В случае, если условие (33) выполнено, корни уравнения вырождаются и приобретают простой вид

$$z_{2,3} = 0; \quad z_{4,1} = \pm \sqrt{|V_{21}|^2 + |V_{23}|^2 + |V_{34}|^2 + |V_{43}|^2} = \pm V. \quad (34)$$

В другом предельном случае, т. е. когда $|V_{ik}| \ll \Delta_{ik}$, корни уравнения определяются выражениями теории возмущений в резонансном приближении:

$$z_1 = \delta_1 + \delta_4, \quad z_2 = \Delta_1 - \delta_1 + \delta_2, \quad z_3 = \Delta_{31} - \delta_2 + \delta_3, \quad z_4 = \Delta_{41} - \delta_3 - \delta_4, \quad (35)$$

где

$$\delta_1 = -\frac{|V_{21}|^2}{\Delta_{21}}; \quad \delta_2 = -\frac{|V_{32}|^2}{\Delta_{32}}; \quad \delta_3 = -\frac{|V_{43}|^2}{\Delta_{43}}; \quad \delta_4 = -\frac{|V_{41}|^2}{\Delta_{41}}. \quad (35')$$

Нумерация корней в этом случае зависит от знаков расстройек и должна быть согласована с нумерацией корней, принятой в (34).

Рассмотрим более подробно случай, когда корни пересекаются. Анализ возможности адиабатического пересечения квазиэнергетических уровней был подробно исследован в работе [10] на примере схемы, представленной на рис. 1в. В [10] показано, что пересечение уровней возможно только в схемах с числом уровней больше трех и для схемы 1в найдены условия их пересечения в случае вырожденной накачки. В работе [10] авторы приходят к выводу, что в случае $D=0$ все миноры третьего порядка также должны обращаться в ноль.

4. Волновая функция системы в случае точных резонансов

Перейдем к определению полной системы ортонормированных функций в случае $\Delta_{11}=0$. Обозначим величину, входящую в (28),

$$V_{12}V_{34} - V_{32}V_{14} = u \quad (36)$$

и будем считать, что выполняется условие

$$\frac{|u|}{V^2} \ll 1. \quad (36')$$

Физически условие (36') означает, что мы рассматриваем случай, когда находимся вблизи пересечения корней. В этом пределе можно получить простые аналитические решения. Рассмотрим прежде всего волновую функцию системы «атом+поле» Φ_i , которая при $t=0$ переходит в невозмущенную функцию атома Ψ_1 , т. е. постоянные C_i равны $C_1=1$, $C_i=0$ при $i=2,3,4$. Корни уравнения (28) с точностью до величины порядка $\frac{|u|}{V^2}$ имеют следующий вид:

$$z_1 = -V; \quad z_2 = -\frac{|u|}{V}; \quad z_3 = \frac{|u|}{V}; \quad z_4 = V. \quad (37)$$

Подставляя корни уравнения (30) в (24)–(27) и полагая $\Delta_{11}=0$, имеем

$$D_1^1(z_i) = z_i(z_i^2 + |V_{43}|^2 + |V_{32}|^2), \quad (24')$$

$$D_2^1(z_i) = V_{21}z_i^2 - V_{34}u^*, \quad (25')$$

$$D_3^1(z_i) = z_i(V_{21}V_{32} + V_{41}V_{34}) = z_i u_1, \quad (26')$$

$$D_4^1(z_i) = V_{41}z_i^2 + V_{32}u^*. \quad (27')$$

Обратим внимание, что из (24')–(27') следует, что все $D_i^{(1)}$ в точке

пересечения корней, т.е. при $u \rightarrow 0$ и $z_{2,3} = 0$ обращаются в ноль. Выражения (29) для коэффициентов b_i , входящих в (22), имеют простой вид. Опуская длительные, но простые вычисления, выпишем выражение для волновой функции Φ_1 :

$$\begin{aligned} \Phi_1 = & \left\{ \frac{|V_{12}|^2 + |V_{41}|^2}{V^2} \cos Vt + \frac{|V_{43}|^2 + |V_{33}|^2}{V^2} \cos \frac{|u|}{V} t \right\} \Psi_1 + \\ & + i \left\{ \left[-\frac{V_{31}}{V} + \frac{V_{34} u^*}{V^3} \right] \sin Vt - \frac{V_{34}}{V} \frac{u^*}{|u|} \sin \frac{|u|}{V} t \right\} \Psi_2 e^{i\Delta_{11} t} + \\ & + \frac{u_1}{V^2} \left[\cos Vt - \cos \frac{|u|}{V} t \right] \Psi_3 e^{i\Delta_{21} t} - \\ & - i \left\{ \left[\frac{V_{41}}{V} + \frac{V_{32} u^*}{V^3} \right] \sin Vt - \frac{V_{32}}{V} \frac{u^*}{u} \sin \frac{|u|}{V} t \right\} \Psi_4 e^{i\Delta_{11} t}, \end{aligned} \quad (38)$$

где u_1 определено выражением (26').

Аналогичным образом вычисляются и Φ_2, Φ_3, Φ_4 . Единственно, что необходимо сделать, это заменить матрицы $D_i^j(z)$ на матрицы $D_i^s(z), D_i^3(z), D_i^4(z)$. Соответственно при нахождении функций Φ_2, Φ_3, Φ_4 матрицы D_i^s получаются из матрицы $D(z)$, если заменить s -ый столбец матрицы (20) на столбец коэффициентов $|C_1 C_2 C_3 C_4|$, в котором s -ый элемент столбца заменен на единицу, а остальные элементы столбца заменены на нули. Это будет соответствовать выбору начальных условий $\Phi_s(t \rightarrow 0) \rightarrow \Psi_s$. Из структуры выражения (22) следует, что полученная таким образом система функций $\Phi_s (s=1, 2, 3, 4)$ образует полную систему ортонормированных функций задачи. Действительно,

$$\int \Phi_s^* \Phi_r dV = \int \left(\sum_i b_i^s e^{i\Delta_{11} t} \Psi_i \right)^* \left(\sum_j b_j^r e^{i\Delta_{11} t} \Psi_j \right) dV = b_i^{s*} b_i^r = \delta_{ss'}. \quad (39)$$

Рассмотрим предельные случаи, когда происходит выключение резонансных полей. Обратим внимание, что при $V_{41} = V_{43} = V_{32} = 0$ волновая функция (38) и аналогичные ей для $s=2, 3, 4$ переходят в хорошо исследованные волновые функции [11] для двухуровневого атома, находящегося в электромагнитном поле, частота которого близка к частоте E_{21} . Функция (38) и аналогичные ей для $s=2, 3, 4$ при $V_{41} = V_{34}$ переходят в исследованные М. А. Саркисяном в 1984 г. (частное сообщение) функции для трехуровневой системы, находящейся в двух полях, частоты которых совпадают с E_{21} и E_{31} соответственно.

Квадраты модулей коэффициентов перед Ψ_i дают вероятности нахождения системы «атом+поле» в определенных атомных состояниях Ψ_i . Из выражения (38) следует, что населенности атомных уровней носят осцилляционный характер с двумя характерными периодами $T_1 = \frac{2\pi n}{V}$ и $T_2 = \frac{2\pi n V}{|u|}$. Такого типа осцилляции экспериментально не наблюдались. Используя функции системы «атом+поле», можно рас-

считать вероятность генерации третьей гармоники на отдельном атоме, а также вероятность других радиационных процессов. Случай пересечения уровней должен быть детально проанализирован. В случае, если условие точных резонансов не выполняется, простого аналитического решения уравнения $D=0$ не существует и необходимо использовать численные методы для расчетов населенностей уровней. Аналогичная ситуация имеет место, когда не выполняется условие $|u| \ll V^2$. Этим вопросам должны быть посвящены специальные исследования применительно к конкретным экспериментальным условиям. Однако полученные выше аналитические решения будут полезны для сравнения с численными расчетами конкретных схем четырехуровневых систем, взаимодействующих с четырьмя резонансными полями. Исследованный выше метод дает возможность получать решения и для задач о поведении четырехуровневой системы в поле последовательных импульсов, моменты включения которых сдвинуты друг относительно друга. Например, в случае двух импульсов начальные значения C_i для решения задачи со вторым импульсом должны определяться из решения задачи для первого импульса. Начальные условия, задаваемые равенством

$$\Phi^*(t-t_i) = \sum_k C_k^* \Psi_k, \quad (40)$$

при произвольном наборе постоянных C_k , должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_k |C_k|^2 = 1. \quad (41)$$

Изложенный выше метод можно применить и в случае, когда на систему «атом+поле» действуют внешние поля, зависящие от времени. Используя метод вариации произвольных постоянных C_i , можно тем же способом решить систему уравнений типа (14) с дополнительными членами в правой части, учитывающими взаимодействие с внешним полем, и получить обобщенные решения, которые в случае обычного уравнения для осциллятора будут описывать «вынужденные» решения. Еще более важным является распространение этого метода на случай, когда вместо монохроматических лазерных излучений в уравнения (14) будут входить величины V_{ik} , медленно зависящие от времени.

Работа выполнена в рамках темы 96-772, финансируемой из государственных централизованных источников РА, и по гранту 170 ер Международной Соросовской Программы в области точных наук «Института Открытого Общества».

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Bloembergen, Y. R. Shen. Phys. Rev., 133A, 37 (1964).
2. M. L. Ter-Mikaelyan, M. A. Sarkissian. In Proceedings of 6th International conference on atomic physics. Riga, 1978, с. 462.
3. А. О. Меликян, С. Г. Саакян. ЖЭТФ, 76, 1530(1979).
4. А. О. Меликян, С. Г. Саакян. ДАН АрмССР, 70, 33(1980).
5. Дж. Райнтжес. Нелинейные оптические параметрические процессы в жидкостях и газах. М., Мир, 1987.
6. Н. Н. Боголюбов, Ю. А. Миτροпольский. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., ИФМЛ, 1958.
7. N. D. Sen-Gupta. J. Phys. A, 3, 618 (1970).
8. М. А. Саркисян, М. Л. Тер-Микаелян. Препринт ИФИ-78-75, Аштарак, 1978.
9. В. И. Смирнов. Курс высшей математики, т.3, ч.2. М., ИТТЛ, 1953.
10. А. О. Меликян, С. Г. Саакян. Препринт ИФИ-76-34. Аштарак, 1976.
11. М. Л. Тер-Микаелян. Препринт ИФИ-74-11, Ереван, 1974.

*ՊԱՐԶԱԳՈՒՅՆ ԱՏՈՄՆԵՐԻ ՀԵՏ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ
ՌԵԶՈՆԱՆՍԱՅԻՆ ՓՈՆԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՀԵՏԱԶՈՏՄԱՆ ՆՈՐ ՄԵԹՈԴ*

Մ. Լ. ՏԵՐ-ՄԻԿԱԵԼՅԱՆ

Ներկայացված է ատոմների հետ լազերային ճառագայթման ակտիանսային փոխազդեցության հետազոտման նոր մեթոդ: Որպես օրինակ բննարկված է չորսմակարդակային ատոմային համակարգ, որը փոխազդում է չորս ակտիանսային դաշտերի հետ:

A NEW METHOD FOR STUDY OF RESONANT INTERACTION OF LASER RADIATION WITH SIMPLE ATOMS

M. L. TER-MIKAELIAN

A new method for study of the resonant interaction of the laser interaction with the atoms is discussed. As an example, the four-level atomic system interacting with the four resonance fields is considered.

УДК 548.0

ВЛИЯНИЕ СИЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Г. А. ВАРДАНЯН, А. А. ГЕВОРГЯН

Московский государственный университет
Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 2 мая 1995 г.)

Рассмотрено прохождение и отражение света при нормальном его падении на планарный слой холестерического жидкого кристалла (ХЖК). Изучены зависимости оптических характеристик от мнимых частей средней диэлектрической проницаемости и диэлектрической анизотропии. Выявлен эффект уменьшения доли энергии света, поглощенной в образце при увеличении мнимой части диэлектрической анизотропии. Представлены спектры отражения и пропускания, а также зависимость коэффициента отражения от толщины при различных значениях среднего поглощения и анизотропии поглощения.

Введение

При взаимодействии электромагнитной волны с поглощающими периодическими средами существенную роль играют в основном два механизма: поглощение излучения и дифракция. Возможны самые разнообразные проявления конкуренции этих двух механизмов во влиянии на отражение и пропускание. Известен эффект Бормана [1—3], а также эффект аномально сильного поглощения излучения в периодических средах вблизи границ области селективного (дифракционного) отражения (ОСО) [4]. В работе [5] выявлен эффект уменьшения поглощения излучения в сильнопоглощающих периодических средах вблизи границы ОСО при увеличении толщины слоя, тоже являющийся результатом конкуренции этих механизмов. В работе [5] получены также точные аналитические формулы для амплитуд полей и для коэффициентов отражения и прохождения при нормальном падении света на слой среды со спиральной структурой, ось которой перпендикулярна граничным поверхностям.

В данной работе мы, основываясь на результатах работы [5], изучили зависимости оптических характеристик ХЖК от параметров $\text{Im}\varepsilon_m$, $\text{Im}\varepsilon_a$ (здесь $\varepsilon_m = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$, $\varepsilon_a = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/2$, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — главные значения тензора диэлектрической проницаемости в плоскости, перпендикулярной оси среды). Выявлено уменьшение величины, характеризующей долю энергии света, поглощенной в образце, с увеличением анизотропии поглощения (с одновременным увеличением $\text{Im}\varepsilon_m$, поскольку рассматривается случай $\text{Im}\varepsilon_a = \text{Im}\varepsilon_m$). Максимальное поглощение на-

блюдается не при больших значениях параметра $\text{Im}\varepsilon_a$, как, например, в обычных изотропных и анизотропных средах, а при определенном значении $\text{Im}\varepsilon_a$. С дальнейшим увеличением $\text{Im}\varepsilon_a$ поглощение излучения уменьшается.

Результаты расчетов

Рассмотрим прохождение и отражение монохроматического света при нормальном его падении на планарный слой ХЖК. Пусть среда занимает пространство между плоскостями $z=0$ и $z=d$, а из области $z<0$ на границу $z=0$ падает волна в направлении нормали. Будем считать, что на образец падает свет круговой поляризации, дифрагирующий в холестерике (взаимодействие со средой света противоположной круговой поляризации особенностей поглощения не проявляет). Кроме того, предполагается, что диэлектрическая проницаемость среды, граничащей с обеих сторон со слоем ХЖК, равна средней диэлектрической проницаемости холестерика ε_m , т.е. рассматривается случай минимального влияния диэлектрических границ, и основную роль играют дифракция и поглощение в объеме. Решая граничную задачу, заключающуюся в непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей, для компонент полей отраженного и прошедшего световых волн получаем:

$$\begin{aligned} E_{ix} &= [a_1(\gamma + 2\chi - \delta) + a_2(\gamma - 2\chi + \delta)] / \Delta, \\ E_{iy} &= i[a_1(\gamma + 2\chi + \delta) + a_2(\gamma - 2\chi - \delta)] / \Delta, \\ E_{rx} &= iu\delta[s_2 a_1(\gamma + 2\chi - \delta) + s_1 a_2(\gamma - 2\chi + \delta)] / \Delta, \\ E_{ry} &= u\delta[s_2 a_1(\gamma + 2\chi + \delta) + s_1 a_2(\gamma - 2\chi - \delta)] / \Delta, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\Delta = 2\gamma a_1 a_2$, $a_{1,2} = \cos(k_{1,2}d) \mp iu l_{1,2} \sin(k_{1,2}d) / (k_{1,2}d)$,

$$l_{1,2} = \gamma \pm 2, \quad k_{1,2} = 2u\sqrt{1 + \chi^2 \pm \gamma/d}, \quad \gamma = \sqrt{4\chi^2 + \delta^2},$$

$$u = \pi d \sqrt{\varepsilon_m} / \lambda, \quad \delta = \varepsilon_a / \varepsilon_m, \quad \chi = \lambda / 2\sqrt{\varepsilon_m},$$

λ — длина волны в вакууме. Направление оси x совпадает с направлением директора на входной границе слоя.

Отсюда для коэффициентов отражения и прохождения соответственно получаем:

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{u\delta}{2\gamma} \left\{ \left| \frac{s_1}{a_1} \right|^2 (|\delta|^2 + |\gamma - 2\chi|^2) + \left| \frac{s_2}{a_2} \right|^2 (|\delta|^2 + |\gamma + 2\chi|^2) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\text{Re} \left[\frac{s_1 s_2^*}{a_1 a_2^*} [|\delta|^2 + (\gamma - 2\chi)(\gamma + 2\chi)^*] \right] \right\} \right|^2, \\ T &= \frac{1}{|2\gamma|^2} \left\{ \frac{|\delta|^2 + |\gamma - 2\chi|^2}{|a_1|^2} + \frac{|\delta|^2 + |\gamma + 2\chi|^2}{|a_2|^2} + \right. \\ &\quad \left. + 2\text{Re} \left[\frac{(\gamma - 2\chi)(\gamma + 2\chi)^* - |\delta|^2}{a_1 a_2^*} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Звездочками обозначены комплексно-сопряженные соответствующих величин.

Для величины $Q=1-(R+T)$, характеризующей поглощенную в среде световую энергию, будем иметь:

$$Q=1-\frac{1}{|2\gamma|^2} \left\{ \frac{|\delta|^2+|\gamma-2\chi|^2}{|a_1|^2} (1+|u\delta s_1|^2) + \frac{|\delta|^2+|\gamma+2\chi|^2}{|a_2|^2} (1+|u\delta s_2|^2) + 2\text{Re} \left[\frac{(\gamma-2\chi)(\gamma+2\chi)^*}{a_1 a_2^*} (1-|u\delta|^2 s_1 s_2^*) - |\delta|^2 (1+|u\delta|^2 s_1 s_2^*) \right] \right\}. \quad (3)$$

Считая анизотропию δ малой и пренебрегая членами, пропорциональными δ^2 , и учитывая тот факт, что в ОСО при достаточно большой толщине $|\sin k_z d| \gg 1$, для коэффициентов отражения и прохождения получаем следующие простые приближенные формулы:

$$R = \left| \frac{u\delta s_2}{a_2} \right|^2, \quad T = \left| \frac{1}{a_2} \right|^2. \quad (4)$$

В этом приближении для Q получаем:

$$Q = 1 - \frac{1 + |u\delta s_2|^2}{|a_2|^2}. \quad (5)$$

Несмотря на наличие аналитических формул, анализ отражения и пропускания света, а также особенностей поглощения излучения в зависимости от толщины слоя целесообразно проводить, используя численные расчеты по формулам (1)-(3)—из-за громоздкости этих формул.

Рассматривая ситуацию присутствия поглощения, мы фактически считаем, что диэлектрическая проницаемость зависит от частоты. Однако в данной работе мы будем считать, что изучаемая область находится вдали от сильной линии поглощения, так что поглощение еще ощутимо, но слабо зависит от частоты.

Вычислена зависимость величины Q от $\ln(\text{Im}2\epsilon_a)$ для различных длин волн падающего света. Расчеты выполнены для ХЖК состава холестерил-нонаноат: холестерил-хлорид: холестерил-ацетат=20:15:6. Вычисления демонстрируют резкую зависимость величины поглощения Q в слое от анизотропии поглощения. С увеличением параметра $\ln(\text{Im}2\epsilon_a)$ величина Q сначала монотонно увеличивается, а потом, проходя через максимум, начинает уменьшаться. Таким образом, наблюдается уменьшение величины, характеризующей долю энергии света, поглощенную в образце, с увеличением анизотропии поглощения. Причем для различных длин волн максимальное поглощение наблюдается при различных значениях параметра $\ln(\text{Im}2\epsilon_a)$. Кроме того, для различных длин волн различна также величина спада поглощения Q в слое после прохождения через пик. При этом наблюдаются следующие закономерности.

1. С удалением от границы ОСО в сторону коротких волн пик в зависимости величины Q от параметра $\ln(1m2e_a)$ смещается в сторону малых значений последнего, причем одновременно уменьшается величина спада параметра Q после прохождения через пик, и она стремится к нулю в пределе Могена.

2. С приближением к коротковолновой границе ОСО значение параметра $\ln(1m2e_a)$, при котором величина Q имеет максимум (это значение величины $\ln(1m2e_a)$ обозначим через S), начинает осциллировать, причем одновременно увеличивается величина указанного спада.

3. После прохождения через пик на длине волны вблизи коротковолновой границы ОСО величина S начинает уменьшаться (одновременно постепенно уменьшается величина спада) и принимает минимальное значение вблизи длинноволновой границы ОСО. Затем, с удалением от длинноволновой границы эта величина постепенно увеличивается (одновременно продолжает уменьшаться величина спада), и начиная с некоторого значения длины волны падающего света эффект уменьшения поглощения излучения практически не наблюдается.

На рис. 1а представлены зависимости величин R и T от λ при

Рис. 1. Зависимость коэффициентов отражения R (сплошные кривые) и прохождения T (пунктирные кривые) от длины волны: а) при различных значениях $\ln(1m2e_a)$ (при условии $\ln(1m2e_m) = \ln(1m2e_a)$): 1. $\ln(1m2e_a) = 0.095$, 2. $\ln(1m2e_a) = 0.025$, 3. $\ln(1m2e_a) = 0.075$, б) при различных значениях $\ln(1m2e_m)$ (при условии $\ln(1m2e_a) = 0$): 1. $\ln(1m2e_m) = 0.005$, 2. $\ln(1m2e_m) = 0.025$, 3. $\ln(1m2e_m) = -0.075$. Остальные параметры пластинки таковы: $Re_{\epsilon_m} = 2.2165$, $Re_{\epsilon_a} = 0.0735$, шаг спирали = $= 0.42 \mu\text{м}$, толщина слоя = $20 \mu\text{м}$.

различных значениях $\text{Im}\epsilon_a$ (при условии $\text{Im}\epsilon_m = \text{Im}\epsilon_a$), а на рис. 1б — при различных значениях $\text{Im}\epsilon_m$ (при условии $\text{Im}\epsilon_a = 0$).

На рис. 2а представлена зависимость коэффициента отражения R от числа витков спирали $m = d/\sigma$ при различных значениях $\text{Im}\epsilon_a$ (при условии $\text{Im}\epsilon_m = \text{Im}\epsilon_a$), а на рис. 2б — при различных значениях $\text{Im}\epsilon_m$ (при условии $\text{Im}\epsilon_a = 0$).

Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения от числа витков спирали $m = d/\sigma$: а) при различных значениях $\text{Im}\epsilon_a$ (при условии $\text{Im}\epsilon_m = \text{Im}\epsilon_a$): 1. $\text{Im}\epsilon_a = 0.005$, 2. $\text{Im}\epsilon_a = 0.025$, 3. $\text{Im}\epsilon_a = 0.05$, б) при различных значениях $\text{Im}\epsilon_m$ (при условии $\text{Im}\epsilon_a = 0$): 1. $\text{Im}\epsilon_m = 0.001$, 2. $\text{Im}\epsilon_m = 0.005$, 3. $\text{Im}\epsilon_m = 0.05$. Остальные параметры те же, что и на рис. 1.

Обсуждение. Выводы

Анализ приведенных результатов численных расчетов выявляет условия, при которых имеет место уменьшение поглощения света при увеличении анизотропии поглощения. Для заданных значений параметров пластинки (длины волны, толщины слоя, параметров $\text{Im}(\text{Im}2\epsilon_m)$, $\text{Re}\epsilon_a$) существует оптимальное значение параметра $\text{Im}(\text{Im}2\epsilon_a)$, для которого реализуется наибольшее значение поглощения Q в слое.

Анализ приведенных результатов показывает, что выявленный эффект имеет место в областях дифракционного взаимодействия света со средой. При этом нужно иметь в виду, что в нашем случае действуют два механизма дифракции: один, обусловленный анизотропией преломления (т. е. отличием от нуля величины $\text{Re}\epsilon_a$), другой, обусловленный анизотропией поглощения, т. е. отличием от нуля величины $\text{Im}\epsilon_a$, и третий, обусловленный конечностью толщины слоя. Как показывают представленные результаты, а также детальный численный

анализ, выявленный эффект обусловлен именно вторым механизмом дифракции. Действительно, как показывают численные расчеты, в предельном случае $\text{Re}\epsilon_a \rightarrow 0$ при условии $\text{Im}\epsilon_a \neq 0$ тоже имеет место дифракционное взаимодействие света со средой, причем и в этом случае также наблюдается эффект уменьшения поглощения излучения с увеличением анизотропии поглощения. Детальный анализ в этом предельном случае позволяет понять физику явления. Нужно также иметь в виду, что значения параметра $\text{Im}\epsilon_a$, соответствующие насыщению поглощения и дифракции, вообще говоря, не равны друг другу; это естественно, так как дифракция и поглощение—разные явления. Увеличение $\text{Im}\epsilon_a$ означает, с одной стороны, увеличение поглощения Q в слое, а с другой стороны—увеличение параметра $d\text{Im}\epsilon_a/\sigma$, характеризующего в данном случае «силу дифракции». Естественно, если величина $\text{Im}\epsilon_a$ уже такая, что проникающее в глубь образца излучение полностью поглощается ($T=0$), то при дальнейшем увеличении величины $\text{Im}\epsilon_a$ величина Q не может увеличиваться. С другой стороны, если при дальнейшем увеличении $\text{Im}\epsilon_a$ увеличивается дифракционное отражение, то это приводит к уменьшению поглощения Q в слое, так как при этом $Q=1-(R+T)=1-R$. Именно такая ситуация и реализуется, т. е. при увеличении величины $\text{Im}\epsilon_a$ поглощение излучения идет на насыщение быстрее, чем дифракционное отражение.

В случае обычных сред со спиральной структурой появляются дополнительные особенности и закономерности, обусловленные наличием трех механизмов дифракции. В частности, как уже отмечалось выше, вблизи коротковолновой границы ОСО величина S осциллирует, причем она максимальна на длинах волн, соответствующих максимумам коэффициента отражения, и минимальна—на минимумах. То, что величина S минимальна на частоте, соответствующей минимуму дифракционного отражения, также находит естественное объяснение. Действительно, на этой частоте излучение проникает в образец максимально глубоко (при отсутствии поглощения излучение распространяется в нем практически без отражения), и поэтому поглощение Q в слое, возрастающее с увеличением глубины проникновения излучения, на этих частотах увеличивается быстрее (с увеличением $\text{Im}\epsilon_a$) и доходит до своего максимального значения раньше, чем на частотах, соответствующих максимумам дифракционного отражения. Вблизи же длинноволновой границы ОСО указанные осцилляции не наблюдаются из-за сильного влияния эффекта Бормана (вследствие аномально сильного поглощения). Из-за этого эффекта наблюдается увеличение S вблизи длинноволновой границы ОСО.

Таким образом, на частотах сильного поглощения величина S имеет минимумы, обусловленные тем, что сильное поглощение уменьшает роль первого механизма дифракции, и поэтому раньше (т. е. при малых значениях S , или, что тоже самое, при малых значениях анизотропии поглощения) начинает сказываться второй механизм дифракции.

Приведенные графики демонстрируют существенную роль характера поглощения (изотропное оно или анизотропное), а также существенное отличие случаев слабого и сильного поглощения. Укажем также на существенное влияние сильного поглощения на период и амплитуду осцилляции коэффициентов отражения и прохождения по частоте. В отсутствие поглощения коэффициент отражения дифрагирующей круговой поляризации света вблизи края ОСО проявляет осцилляции с минимумами интенсивности света, равными строго нулю, частотное положение которых следующим образом зависит от толщины образца: $k_2 d = \pi n, n = 0, 1, 2, \dots$. Коэффициент пропускания при этом $T = 1 - R$. При наличии слабого поглощения изменения отражений сводятся прежде всего к увеличению интенсивности отражения в минимумах осцилляции (интенсивность в минимумах теперь не падает до нуля), а также к уменьшению интенсивности отражения в максимумах осцилляции. При сильном поглощении происходит погашение осцилляции. Интересно, что в случае анизотропного поглощения происходит увеличение отражения начиная с некоторого значения $\text{Im}\epsilon_a$.

Поглощение приводит также к значительному изменению периода и амплитуды осцилляции коэффициентов отражения и прохождения по толщине слоя (рис. 2). О количественной стороне процесса изменения периода осцилляции коэффициента отражения по толщине слоя дает представление следующая таблица.

$\text{Im}\epsilon_a$	$\text{Im}\epsilon_m$	$d_1 = d(R=R_{1min}),$ μm	$d_2 = d(R=R_{2min}),$ μm	$d_2 - d_1, \mu m$
0.000005	0.000005	47.5944	95.18884	47.59444
0.00005	0.00005	47.5944	95.18882	47.59442
0.0005	0.0005	47.5997	95.1876	47.5938
0.005	0.005	47.54	95.08	47.54
0.05	0.05	44.8	90.2	45.4
0	0.00001	47.5944	95.1888	47.5944
0	0.0001	47.5942	95.1882	47.5940
0	0.001	47.56	95.14	47.58
0	0.01	45.4	91.8	46.4

В заключение подчеркнем, что выявленный эффект уменьшения поглощения излучения в периодических структурах вблизи ОСО при увеличении анизотропии поглощения носит весьма общий характер и может проявляться во взаимодействии излучений с различными периодическими средами.

Выражаем благодарность О. С. Ерицану на обсуждение работы.

1. J. Borgman. Z. Phys., 42, 157 (1941).
2. А. М. Афанасьев, Ю. М. Каган. ЖЭТФ, 48, 327(1965); ЖЭТФ, 49, 1540(1965).
3. В. А. Беляков. Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры. М., «Наука», 1988, 256 с.
4. В. А. Беляков и др. ЖТФ, 57, 1418(1987), Кристаллография, 33, 574(1988).
5. Г. А. Варданиян, А. А. Геворгян. Кристаллография, 42, 316(1997).

*Ուժեղ ԿլԱնՄԱն ԱզդեցՈւթՅՈՒՅՈՒՆԸ ԽՈՒՅՍԵՐԻՆԱՅԻՆ ՀԵՂՈՒԿ
ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԲՆՈՒԹԱԳՐԵՐԻ ՎՐԱ*

Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ա. Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Գիտարկված է լույսի անցումը և անդրադարձումը, երբ այն նորմալով ընկնում է խուխտերինային հեղուկ բյուրեղի պլանար շերտի վրա: Ուսումնասիրվել են օպտիկական բնութագրերի կախվածությունները միջին դիէլեկտրիկական թափանցելիության և դիէլեկտրիկ անիզոտրոպիայի կեղծ մասերից: Հայտնաբերված է լույսի էներգիայի նմուշում կլանված մասի փորձացման երևույթը կլանման անիզոտրոպիայի մեծացման դեպքում: Ներկայացված են անցման և անդրադարձման օպտիկաները, ինչպես նաև անդրադարձման գործակցի կախվածությունը շերտի հարստությունից միջին կլանման և կլանման անիզոտրոպիայի տարբեր արժեքների դեպքերում:

INFLUENCE OF STRONG ABSORPTION ON THE OPTICAL PROPERTIES OF CHOLESTERIC LIQUID CRYSTALS

G. A. VARDANIAN, A. H. GEVORGIAN

The problem of light transmission and reflection in the case of its normal incidence on the planar layer of cholesteric liquid crystal is considered. The dependences of optical characteristics on imaginary part of mean dielectric permittivity as well as on dielectrical anisotropy are investigated. The effect of light absorption decreasing in the media with the increasing of the anisotropy of absorption is discovered. The spectra of reflection and transmission, as well as the dependence of reflection coefficient on the thickness at different values of the mean and anisotropic absorption are presented.

О СИЛЕ РЕАКЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Б. В. ХАЧАТРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 8 апреля 1996 г.)

Получена новая формула для силы реакции излучения, действующей на заряженную частицу при ее движении в заданном внешнем электромагнитном поле.

Сила реакции излучения (сила радиационного, или Лоренцева, трения)—это часть силы, действующей на заряд со стороны созданного им электромагнитного поля. Возникает она из-за излучения зарядом электромагнитных волн. Общепринятое выражение для силы реакции излучения $f = -\frac{2e^2}{3c^3} \ddot{v}$ ($v \ll c$, v —скорость частицы, c —скорость света) выводится на основе нестрогих, полукачественных соображений и имеет ряд известных недостатков [1, 2]. В настоящей работе получено новое выражение для силы радиационного трения, которое оставляет уравнение движения заряда с учетом этой силы дифференциальным уравнением второго порядка, не приводит к самоускорению частицы и не противоречит опытным данным.

Будем исходить из следующих рассуждений. Известно (см., например, [1]), что заряженная частица, движущаяся с произвольной скоростью $v(t)$, излучает в единицу времени в телесный угол $d\Omega$ произвольного направления с единичным вектором n энергию

$$dI = \frac{e^2}{4\pi c^3} \left\{ \frac{w^2}{(1-\beta n)^3} + \frac{2(nw)(\beta w)}{(1-\beta n)^4} - \frac{(1-\beta^2)(nw)^2}{(1-\beta n)^5} \right\} d\Omega, \quad (1)$$

где w —ускорение заряда, $\beta = \frac{v}{c}$. Излучение в направлении n уносит с собой в единицу времени импульс $\frac{dI}{c}n$, а заряд, следовательно, приобретает импульс $-\frac{dI}{c}n$. Поскольку изменение импульса в единицу времени равно действующей силе, то вследствие излучения в направлении n , на частицу будет действовать сила $df = -\frac{dI}{c}n$. Интегрируя (см. приложение) по всем направлениям (по полному телесному углу) получим силу f , действующую на частицу из-за излучения ею электромагнитных волн, т. е. силу реакции излучения:

$$f = -\frac{2e^2}{3c^4(1-\beta^2)^2} \left(w^2 + \frac{(w\beta)^2}{1-\beta^2} \right) \beta = -\frac{1}{c} \beta, \quad (2)$$

где

$$I = \frac{2e^2}{3c^3} \cdot \frac{w^2 - |\beta w|^2}{(1-\beta^2)^2} \quad (3)$$

есть полная интенсивность излучения [1] (энергия, излученная по всем направлениям в единицу времени). В ультрарелятивистском случае $f = -\frac{I}{c} \mathbf{n}$, что в свете вышеизложенных рассуждений можно было написать сразу, учитывая, что в случае $v \simeq c$ заряженная частица излучает в основном в направлении своего движения ($\mathbf{n} \simeq \beta$). Легко проверить, что в этом пределе выражение для силы $\mathbf{f}$ совпадает с известным [1].

В нерелятивистском пределе ($v \ll c$) выражение для силы $\mathbf{f}$ существенно отличается от общепринятого:

$$\mathbf{f} = -\frac{2e^2 w^2}{3c^4} \beta. \quad (4)$$

В качестве иллюстрации применим формулу (4) для расчета естественной ширины спектральных линий на примере простейшей системы—линейного гармонического осциллятора. Запишем уравнение движения электрона, связанного упругой силой $-m\omega_0^2 x$, с учетом силы (4) (ω_0 —частота свободных колебаний осциллятора):

$$m\ddot{x} = -m\omega_0^2 x - \frac{2e^2 \dot{x}^2}{3c^5} \dot{x}. \quad (5)$$

Считая силу f малой по сравнению с упругой силой, можно с достаточной степенью точности заменить в (5) квадрат ускорения $w^2 = \dot{x}^2$ на усредненное (по периоду $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$) значение квадрата „невозмущенного“ ускорения $w_0 = -x_0 \omega_0^2 \cos \omega_0 t$ ($x_0 = x(t=0)$). В результате получаем уравнение

$$\ddot{x} + \Gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (6)$$

приводящее, как известно, к уширению спектральной линии с шириной линии

$$\Gamma = \frac{e^2 \omega_0^4 x_0^2}{3mc^5}. \quad (6')$$

Используя общепринятое выражение силы радиационного трения $f = \frac{2e^2}{3mc^3} \ddot{x}$, получается то же уравнение (6), но с шириной уровня $\gamma = \frac{2e^2 \omega_0^2}{3mc^3}$, одинаковой для всех уровней. В нашем же случае ширина

оказывается различной для различных уровней и зависящей от дипольного момента ($\Gamma \sim e^2 x_0^2$), что согласуется с квантовомеханическим результатом расчета ширины уровня как обратной величины времени жизни возбужденного состояния [3].

Приложение. Для получения формулы (2) при интегрировании воспользуемся цепочкой равенств (интегралы везде двукратные:

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$A = \int \frac{n(nw)}{(1-\beta n)^4} d\Omega = \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial \beta} \int \frac{nwd\Omega}{(1-\beta n)^3} = \frac{1}{3} \frac{\partial(Aw)}{\partial \beta},$$

$$B = \int \frac{n(nw)^2}{(1-\beta n)^5} d\Omega = \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} \int \frac{(nw)^2 d\Omega}{(1-\beta n)^4} = \frac{1}{4} \frac{\partial(Aw^2)}{\partial \beta},$$

где

$$a = \int \frac{nd\Omega}{(1-\beta n)^3} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \int \frac{d\Omega}{(1-\beta n)^2}.$$

Последний интеграл легко берется и в результате

$$a = \frac{4\pi\beta}{(1-\beta^2)^2}.$$

В заключение выражаю благодарность участникам семинара кафедры теоретической физики ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория поля. М., 1973.
2. Дж. Джексон. Классическая электродинамика, М., 1965.
3. В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. М., 1956.

ՃԱՌԱԳՆԱՅԹՄԱՆ ՌԵԱԿՑԻՎԱՅԻ ՈՒՇԻ ՄԱՍԻՆ

Բ. Վ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Ստացված է էլեկտրամագնիսական դաշտում շարժվող լիցքավորված մասնիկի վրա ազդող ճառագայթման ռեակցիայի ուժի նոր բանաձև:

ON THE RADIATIVE REACTION FORCE

B. V. KHACHATRYAN

A new formula for the radiative reaction force acting on a charged particle moving in a fixed electromagnetic field is obtained.

УДК 541.64

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНТАЛЬПИИ ПЛАВЛЕНИЯ γ -ОБЛУЧЕННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНСТРУКТУРНЫХ ДАННЫХ

С. С. ФЕЛЕКЯН, В. Ф. МОРОЗОВ, В. И. ВАРДАНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 18 января 1996г.)

Для объяснения изменений параметров элементарных ячеек γ -облученного полиэтилена предложена модель разрыва основной цепи внутри кристалла с учетом модификации концевых групп, образующихся при разрыве основной цепи. Вычислена энтальпия плавления кристаллов полиэтилена независимым от калориметрии методом.

Известно, что γ -облучение влияет на кристаллические участки полиэтилена: увеличиваются степень кристалличности и параметры кристаллической решетки (см. табл.) [1—3]. Рост степени кристалличности объясняется эффектами деструкции и докристаллизации, а изменению параметров кристаллической решетки не было дано четкого объяснения.

Целью настоящей работы является объяснение поведения параметров кристаллической решетки в зависимости от дозы γ -облучения аморфно-кристаллического полиэтилена на основе модели, учитывающей воздействие γ -облучения на кристаллическую фазу, и вычисление энтальпии плавления этой фазы.

Модель формулируется следующим образом: γ -облучение приводит к обрыву основной цепи в кристаллической области с модификацией концевых групп типа $-\text{CH}=\text{CH}_2$ и $-\text{CH}_3$. Обрыв цепи с модификацией приводит к изменению параметров элементарных ячеек вокруг разрыва. Таким образом, в γ -облученной системе будут существовать два типа ячеек, а экспериментально определяемые параметры представляют линейную комбинацию параметров двух типов ячеек. Отсюда следует, что с увеличением дозы облучения, или числа оборванных макромолекул в кристалле, будет наблюдаться увеличение экспериментально определенных размеров элементарных ячеек кристаллитов.

Появление $-\text{CH}=\text{CH}_2$ группы в кристалле полиэтилена изменяет картину межмолекулярных взаимодействий, что безусловно приведет как к изменению энергии когезии, связанной с энтальпией плавления кристалла, так и к изменению параметров элементарных ячеек.

Энергия на моль мономерного звена ($-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$) полиэтилена в кристалле (далее энергия когезии кристалла) рассчитывается методом атом-атом потенциалов. Расчет основывается на утверждениях

ТАБЛИЦА. Зависимость параметров элементарной ячейки от дозы γ -облучения (по данным работы [2]).

Доза (Мрад)	a (Å)	b (Å)
0	7.474	4.973
5	7.476	4.977
10	7.470	4.977
50	7.472	4.977
70	7.476	4.977
100	7.484	4.978
125	7.492	4.981
150	7.502	4.978
175	7.500	4.981
200	7.504	4.985
225	7.508	4.983
250	7.516	4.983
275	7.516	4.983
300	7.518	4.982

[4, 5], что 1) все макромолекулы полиэтилена в кристаллических участках имеют транс-конформацию (плоский зигзаг), 2) в кристаллитах полиэтилена элементарная ячейка имеет орторомбическую симметрию, 3) полиэтилен является гомополимером с эквивалентными звеньями.

Результаты вычислений энергии когезии такой плоской группы ($-\text{CH}=\text{CH}_2$) в кристалле полиэтилена (с условием, что в объеме суммирования другой такой группы нет) показывают, что новая плоская группа расширяет элементарную ячейку по параметру a примерно на 0,17 Å, а по b сжимает более, чем на 0,1 Å. В действительности же этому будут противостоять остальные CH_2 группы новых кусков оборванной цепи макромолекулы. Расчет показывает, что группа $(\text{CH}_2-\text{CH}_2)_{20}-\text{CH}=\text{CH}_2$ в кристаллите полиэтилена приводит к образованию элементарных ячеек в области оборванной цепи с увеличенным на 0,04—0,05 Å параметром a . Появление ячеек с измененными параметрами, в свою очередь, приводит к изменению удельной энтальпии плавления системы.

Удельную энтальпию плавления всего кристалла представим как сумму удельных энтальпий плавления участков каждого типа:

$$\Delta H = \Delta H_0(1 - \vartheta) + \Delta H_1 \cdot \vartheta, \quad (1)$$

где ΔH_0 —энтальпия плавления невозмущенного кристалла, ΔH_1 —энтальпия плавления участков кристалла с увеличенными параметрами элементарной ячейки, ϑ —объемная доля участков нового типа.

Если в рамках выбранной модели дефектом будем считать наличие ячеек с увеличенными параметрами вокруг оборванной макро-

молекулы, то θ можно считать параметром дефектности системы. Таким образом, для оценки энтальпии плавления γ -облученного полиэтилена необходимо оценить ΔH_0 , ΔH_1 и θ в выражении (1).

Для расчета энтальпии плавления исходным является предположение о том, что состояние аморфной фазы системы эквивалентно состоянию расплава, хотя мы вполне осознаем тот факт, что аморфное состояние является состоянием с детерминированным беспорядком, и переходы из аморфного состояния в расплав сопровождаются определенными структурными перестройками. Тем не менее, как показывают литературные данные [6—8], переходы из аморфного состояния в расплав не сопровождаются энергетическими потерями.

Таким образом,

$$\Delta H = U_{\text{распл}} - U_{\text{крист}} = U_{\text{аморф}} - U_{\text{крист}} \quad (2)$$

Отсюда, для корректного определения энтальпии плавления необходимо определение, в рамках принятых предположений, энергии когезии звена в аморфном состоянии. Поскольку жидкое состояние имеет ближний порядок, расчет $U_{\text{аморф}}$ мы проводим в рамках схемы расчета энергии когезии кристаллической структуры.

Как известно, кристаллы парафинов при температурах, близких к плавлению, претерпевают полиморфное превращение и переходят в ротационно-кристаллическое состояние, представляющее собой плотную упаковку цилиндров [5]. Если предположить, что ближний порядок расплава полиэтилена имеет псевдогексагональную структуру и аморфное гало есть не что иное, как отражение от плоскостей $\{100\}$, то можно определить параметр $a_{\text{гекс}}$ и вычислить параметры элементарной ячейки при орторомбической симметрии [3], как

$$a = \sqrt{3} a_{\text{гекс}} = 2d_{100} = 9,0 \text{ \AA}, \quad b = a_{\text{гекс}} = \frac{2}{\sqrt{3}} d_{100} = 5,2 \text{ \AA}.$$

Используя параметры мнимой орторомбической ячейки расплава полиэтилена, можно определить энергию когезии одного моля мономерного звена ($-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$) в расплаве полимера: $U_{\text{аморф}} = -8,17 \text{ кДж/моль}$.

Из кривой дифракции рентгеновских лучей под большими углами определяя параметры элементарной ячейки и степень кристалличности γ полиэтиленового образца, можно вычислить $U_{\text{крист}}(a, b)$ методом атом-атом потенциалов, а удельную энтальпию плавления образца Δh находим из формулы

$$\Delta h = [U_{\text{аморф}} - U_{\text{крист}}(a, b)] \cdot \gamma / 2,8 \text{ (Дж/г)}, \quad (3)$$

где величина 2,8 определяет переход Δh в Дж/г.

При $a = 7,45 \text{ \AA}$, $b = 4,97 \text{ \AA}$, $\gamma = 45\%$ для исходного образца полиэтилена получается $\Delta h = 128 \text{ Дж/г}$, что хорошо совпадает с результатом измерения удельной энтальпии плавления микрокалориметрическим методом: $116,4 \text{ Дж/г}$.

Для получения значения ΔH_1 в выражении (3) $U_{\text{крист}}$ вычисляется

АМПЛИФАЗОМЕТР СВЧ

А. Г. ГУЛЯН, Г. А. ДВОЯН, Р. М. МАРТИРОСЯН, Г. А. ПИРУМЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 20 января 1996г.)

Описан метод построения измерителей одновременного измерения относительного изменения амплитуды и разности фаз СВЧ сигналов с применением фазовой модуляции входных сигналов. Приведена структурная схема амплифазометра.

При решении многих научных и технических задач, таких как исследование параметров СВЧ четырехполюсников, настройка радиотелескопов и фазированных антенных решеток, в радиолокации и метрологии часто возникает необходимость одновременного измерения амплитуды и фазы СВЧ сигнала.

Существующие амплифазометры в основном многоканальные (двухканальные) [1—3]. Неидентичность амплитуднофазовых и частотных характеристик, а также фазовые флуктуации СВЧ элементов в разных каналах ограничивают возможности по повышению точности измерения.

Чтобы избавиться от указанных недостатков, предлагается один из вариантов построения одноканального амплифазометра, где входные СВЧ сигналы после определенного преобразования объединяются в один СВЧ канал, что дает возможность осуществить их усиление и детектирование, не накладывая на их амплитудно-фазовую характеристику добавочных условий.

Структурная схема такого амплифазометра приведена на рис. 1. Принцип работы прибора основан на преобразовании относительного изменения амплитуды и разности фаз СВЧ сигналов в амплитуду и разность фаз НЧ сигналов путем фазовой модуляции входных сигналов по специальным законам.

Пусть на входы амплифазометра подаются измеряемый $\dot{E}_1 = E_1 \exp[j(\omega t + \varphi_1)]$ и опорный $\dot{E}_0 = E_0 \exp[j(\omega t + \varphi_0)]$ СВЧ сигналы, где E_1 и E_0 — амплитуды, φ_1 и φ_0 — начальные фазы, а ω — циклическая частота сигналов. Эти сигналы модулируются по фазе фазовыми манипуляторами (1) и (2) с двумя значениями фазовых индексов „0“ и „ $-\pi/2$ “, по законам $f_1(t)$ и $f_2(t)$.

Законы модуляции

$$f_1(t) = \begin{cases} -j, & \text{при } -\pi + 2\pi n < \Omega t < \frac{\pi}{2} + 2\pi n \\ 1, & \text{при остальных значениях } \Omega t \end{cases} \quad (1)$$

$$f_1(t) = \begin{cases} -j, & \text{при } -\frac{\pi}{2} + 2\pi n < \Omega t < \pi + 2\pi n \\ 1, & \text{при остальных значениях } \Omega t \end{cases}$$

приведены на рис. 2 (а, б) (Ω —частота модуляции).

Рис. 1. Структурная схема амплифазометра.

Рис. 2. Графическое изображение законов модуляции (а, б) и огибающая напряжения U_1 (в).

Модулированные таким образом СВЧ сигналы суммируются сумматором мощности (3) и усиливаются СВЧ усилителем (4), на выходе которого напряженность сигнала имеет вид

$$\dot{E} = k_1 \exp(j\theta) (Q) \begin{pmatrix} \dot{E}_n \\ \dot{E}_0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где

$$Q = \frac{\sqrt{2}}{2} (f_1(t), f_2(t)) \quad (3)$$

есть матрица преобразования фазовых манипуляторов с сумматором мощности, k_1 —коэффициент усиления СВЧ, θ —некоторая фаза, вносимая усилителем.

На выходе СВЧ детектора (5) получим низкочастотный сигнал, равный

$$U_x = \alpha \dot{E} E, \quad (4)$$

где α —некоторый постоянный коэффициент, зависящий от параметров СВЧ детектора.

Учитывая (1)–(3), из выражения (4) получим значения детектированного напряжения

$$U_x = \begin{cases} M, & \text{при } -\pi + 2\pi n < \Omega t < -\frac{\pi}{2} + 2\pi n, \\ N, & \text{при } -\frac{\pi}{2} + 2\pi n < \Omega t < \frac{\pi}{2} + 2\pi n, \\ S, & \text{при } \frac{\pi}{2} + 2\pi n < \Omega t < \pi + 2\pi n, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} M &= \frac{\alpha k_1^2}{2} (E_0^2 + E_n^2 + 2E_0 E_n \sin \varphi), \\ N &= \frac{\alpha k_1^2}{2} (E_0^2 + E_n^2 + 2E_0 E_n \cos \varphi), \\ S &= \frac{\alpha k_1^2}{2} (E_0^2 + E_n^2 - 2E_0 E_n \sin \varphi), \end{aligned} \quad (6)$$

$\varphi = \varphi_n - \varphi_0$ —разность фаз между входными СВЧ сигналами.

Вид огибающего напряжения U_x на выходе квадратичного детектора показан на рис. 2(в).

Из выражения (6) видно, что выходное напряжение квадратичного детектора не зависит от θ , т.е. в одноканальном амплифазометре фазовая характеристика усилителя СВЧ не влияет на точность измерения.

С выхода СВЧ детектора сигнал подается на вход селективного низкочастотного усилителя, настроенного на циклическую частоту модуляции Ω . Выполнив несложное для данного случая фурье-преобразование [4], получаем, что на выходе низкочастотного усилителя (6) усиленная первая гармоника сигнала равна

$$U_{yc} = \beta E_n \cos(\Omega t - \varphi), \quad (7)$$

где

$$\beta = \frac{2\pi k_1^2 k_2}{\pi} E_0, \quad (8)$$

k_2 —коэффициент усиления НЧ усилителя.

Низкочастотный сигнал U_{yc} одновременно подается на вход линейного детектора (7) и на один из входов НЧ фазометра (8), а на другой вход фазометра подается низкочастотное напряжение $U_{оп} = U_0 \cos \Omega t$ от генератора опорных напряжений (9).

На выходах линейного детектора и низкочастотного фазометра будем иметь напряжение $U = \beta E_n$, прямо пропорциональное амплитуде измеряемого сигнала, и показание разности фаз φ между входными сигналами.

Таким образом, из вышеизложенного следует, что предлагаемый одноканальный амплифазометр работоспособен и имеет очевидное преимущество над многоканальными.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Гладкий, И. С. Пархоменко. ПТЭ, № 4, 242 (1990).
2. Г. А. Двоян, Г. А. Пирумян, В. В. Мусатов. Тез. докладов XIV Всес. радиотрономической конференции, Ереван, 1985, с. 249—250.
3. О. П. Галахова, Е. Д. Колтик, С. А. Кравченко. Основы фазометрии. Л., Энергия, 1976.
4. Г. М. Фихтенгольц. Основы математического анализа, т. 1. М., Наука, 1964.

ԳՐԶ ԼԱՅՆՈՒՅԹԱՓՈՒԼԱԶՄ

Ա. Գ. ՂՈՒԹԱՆ, Գ. Ա. ԴՎՈՅԱՆ, Ի. Մ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ, Հ. Ա. ՓԻՐՈՒՄՅԱՆ

Նկարագրված է ԳՐԶ ազդանշանի լայնույթի և փուլի միաժամանակյա չափման մեթոդ՝ հիմնված մուտքային ազդանշանների փուլային մոդուլյացիայի վրա: Բերված է լայնույթափուլաչափի կառուցվածքային սխեման:

MICROWAVE AMPLITUDE-PHASEMETER

A. G. GOULIAN, G. A. DVOYAN, R. M. MARTIROSSIAN, H. A. PIROUMIAN

A construction method of a device designed for simultaneous measurement of relative amplitude and phase difference of microwave signals is described, where a phase manipulation of input signals is used. The structural diagram of the gauge is given.

CONTENTS

L. Sh. Grigorian, A. A. Saharian. Quntum radiation of scalar particles by moving mirrors. I.	223
D. H. Badalyan, R. M. Abrahamian. Application of atom-atom potentials in investigation of rotative phase transitions in plastic and liquid crystals. II. Liquid crystals	229
A. M. Ishkhanyan. Asymmetric diffraction of three-level atoms in the field of two standing waves	235
M. L. Ter-Mikaelyan. A new method to analyse the resonant interaction of laser radiation with simple atoms	242
G. A. Vardanian, A. H. Gevorgian. Influence of strong absorption on the optical properties of cholesteric liquid crystals	252
B. V. Khachatryan. On the radiative reaction force	260
S. S. Felekian, V. F. Morozov, V. I. Vardanian. Method of determination of the γ -irradiated polyethylene melting enthalpy on the base of X-ray structural data.	263
A. G. Goulian, G. A. Dvovyan, R. M. Martirosian, H. A. Piroumian. Microwave amplitude-phase meter	267

Բ Ո Վ Ա Ն Դ Ա Կ Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն

Լ. Շ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ա. Ա. ՍԱՀԱՐՅԱՆ. Սկալյար մասնիկների քվանտային ճառագայթումը շարժվող հայելիներով: I	223
Դ. Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ռ. Մ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ. Ատոմ-ատոմ պոտենցիալների կիրառությունը պլաստիկ և հեղուկ բյուրեղներում պատակամ ֆազային անցումները ուսումնասիրելիս: II. Հեղուկ բյուրեղներ	229
Ա. Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ. Եռամակարդակ ատոմների սիմետրիկ դիֆրակցիան երկու կանգուն ալիքների դաշտում	235
Մ. Լ. ՏԵՐ-ՄԻԿԱԵԼՅԱՆ. Պարզագույն ատոմների հետ լազերային ճառագայթման ռեզոնանսային փոխազդեցության հետազոտման նոր մեթոդ	242
Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ա. Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ուծեղ կլանման ազդեցությունը խոլեստերիկային հեղուկ բյուրեղների օպտիկական բնութագրերի վրա	252
Բ. Վ. ԽԱՇԱԿՅԱՆ. Ծառագայթման ռեակցիայի ուժի մասին	260
Ս. Ս. ՖԵԼԵԿՅԱՆ, Վ. Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ, Վ. Ի. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ. Ռենտգենակառուցվածքային անալիզի տվյալներով ճառագայթաբարձած պոլիէթիլենի հալման էնթալպիայի որոշման մեթոդ	263
Ա. Գ. ԳՈՒԼՅԱՆ, Գ. Ա. ԴՎՈՅԱՆ, Ռ. Մ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ, Հ. Ա. ՓԻՐՈՒՄՅԱՆ. ԳԲՀ լայնութափուլաչափ	267

Технический редактор В. Д. СТЕПАНЯН

Сдано в набор 5.05.1997 г. Подписано к печати 2.07.1997 г.
 Формат 70×108¹/₁₆. Бумага № 1, «сыктывкарская». Высокая печать. Печ. лист. 3,25.
 Усл. печ. лист. 4.55. Усл. кр. отт. 4,5. Тираж 200. Заказ 6.
 Издат. 7952. Цена договорная.

Издательство «Гитутюн» НАН РА, 375019, Ереван-19, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.
 Типография Издательства НАН Армении, 378410, г. Аштарак.

[500985]

A2K 415
1997, h. 32m

Индекс 77709

СОДЕРЖАНИЕ

- Л. Ш. Григорян, А. А. Саарян. Квантовое излучение скалярных частиц движущимися зеркалами. I. 223
- Д. А. Бадалян, Р. М. Абрамян. Применение атом-атом потенциалов при исследовании вращательных фазовых переходов в пластических и жидких кристаллах. II. Жидкие кристаллы 229
- А. М. Ишханян. Асимметричная дифракция трехуровневых атомов в поле двух стоячих волн 235
- М. Л. Тер-Микаелян. Новый метод исследования резонансного взаимодействия лазерного излучения с простейшими атомами 242
- Г. А. Варданиян, А. А. Геворгян. Влияние сильного поглощения на оптические характеристики холестерических жидких кристаллов 252
- Б. В. Хачатрян. О силе реакции излучения 260
- С. С. Фелекян, В. Ф. Морозов, В. И. Варданиян. Метод определения энтальпии плавления γ -облученного полиэтилена на основе рентгенструктурных данных. 263
- А. Г. Гулян, Г. А. Двоян, Р. М. Мартиросян, Г. А. Пирумян. Амплифазометр СВЧ 267