# РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЧНО ПОЛЯРИЗОВАННОГО СВЕТА ОРИЕНТИРОВАННЫМИ АТОМАМИ

#### М. Я. Агре\*

Международный Соломонов университет 01135, Киев, Украина

Поступила в редакцию 24 апреля 2001 г.

Получено компактное выражение для сечения рассеяния света произвольной поляризации ориентированными атомарными системами, в котором явно выделена зависимость от геометрических параметров и параметров Стокса, задающих состояние частичной поляризации падающего излучения. Установлено, что сечение любого фотопроцесса, сопровождающегося поглощением (вынужденным излучением) фотона, содержит сумму произведений кругового и линейных дихроизмов процесса на соответствующие параметры Стокса. Исследовано влияние ориентации атома и эффектов диссипации световой энергии на поляризационные особенности и угловое распределение рассеянного света. Показано, в частности, что при открытом диссипативном канале угловое распределение сохраняет зависимость от ориентации атома даже в случае нулевой степени циркулярной поляризации рассеянного излучения.

PACS: 32.80.Cy

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В обычных условиях свободной ориентации магнитные подуровни атома заселены равномерно. Такой неполяризованный атом является симметричной системой. Неравномерность заселенностей состояний с различными значениями проекции момента (поляризация атома) нарушает симметрию, что существенным образом влияет на процессы взаимодействия поляризованного атома с электромагнитным излучением. Атом поляризуется при поглощении света, столкновениях и других процессах. Для поляризации атомов разработан специальный метод оптической накачки (см. обзоры [1,2]), и некоторые элементарные фотопроцессы на поляризованных атомах (фотоэффект, излучение и поглощение света) хорошо изучены (см. [3] и содержащиеся там ссылки, а также [4, 5]).

Напомним, что в общем случае поляризованный атом находится в смешанном квантовомеханическом состоянии. Разложение его матрицы плотности на неприводимые компоненты, которые называются мультиполями состояния (статистическими тензорами) [3], позволяет выделить различные типы поляризации. Мультиполь состояния  $\rho_{KQ}$ ,  $K = 0, 1, \ldots, 2j_1$ , где  $j_1$  — квантовое число полного момента атома в поляризованном состоянии,  $Q = -K, -K + 1, \ldots, K$  представляет собой неприводимый тензор K-го ранга. При этом

$$\rho_{00} = (2j_1 + 1)^{-1/2},$$

и в отсутствие поляризации все остальные мультиполи состояния обращаются в нуль. Атом называется ориентированным, если отличен от нуля тензор  $\rho_{1Q}$ , пропорциональный сферическим компонентам среднего момента **j** поляризованного атома. При  $\rho_{2Q} \neq 0$ атом называют выстроенным.

Общая теория рассеяния света поляризованным атомом развита в работе [6]. Было показано, в частности, что дифференциальное сечение дипольного рассеяния может содержать мультиполи состояния до четвертого ранга включительно, а полное сечение — до второго. В выражении для сечения рассеяния была выделена зависимость от геометрических параметров, однако сечение записывалось в довольно громоздком виде, содержащем неприводимые тензоры, составленные из векторов поляризации падающего и рассеянного фотонов (см. ниже формулу (2)). При таком представлении сечения анализ многих эффектов, которые можно наблю-

<sup>\*</sup>E-mail: markag@aport2000.ru

дать экспериментально, оказывался затруднительным. В последующих работах рассматривались так называемые диссипативно-индуцированные эффекты при рассеянии света на ориентированных [7] и выстроенных [8] атомах, обусловленные открытыми в процессе рассеяния каналами диссипации световой энергии. Соответствующие сечения для случая чистой поляризации падающего света удавалось при этом представить в более простой форме, содержащей скалярные и векторные произведения векторов.

В данной работе получено компактное выражение для сечения рассеяния частично поляризованного света на ориентированных атомах. В сечении выделена зависимость от параметров Стокса, задающих поляризацию света, и от геометрических параметров. Исследуется влияние ориентации атома и диссипативно-индуцированных эффектов на поляризационные особенности и угловое распределение рассеянного света. В частности, показано, что ориентация приводит к зависимости углового распределения рассеянного излучения от степени циркулярной поляризации падающего света, а связанная с ориентацией зависимость углового распределения от степени линейной поляризации света является диссипативно-индуцированной. Для определенности в дальнейшем мы будем говорить об атомах, но результаты работы относятся и к рассеянию света ориентированными молекулами, так как вся информация о внутренней структуре мишени содержится в приведенных матричных элементах тензора рассеяния.

# 2. РАССЕЯНИЕ СВЕТА ЧИСТОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

В работе [7] получено выражение для сечения рассеяния света ориентированным атомом в случае, когда квантовые числа полного момента атома в начальном и конечном состояниях  $j_1 = j_2 = 1/2$  (в случае  $j_1 = 1/2$ ,  $j_2 = 3/2$  соответствующее выражение приведено только для линейной поляризации падающего и рассеянного света). Поэтому рассмотрим общий случай произвольных  $j_1$  и  $j_2$ , допустимых правилами отбора.

Формула для сечения рассеяния света поляризованным атомом, приведенная в [6], предполагает, что атом поляризован аксиально-симметрично относительно оси симметрии, задаваемой единичным вектором **n**. В системе координат с осью z, направленной вдоль вектора **n**, только нулевые компоненты  $\rho_{K0} = \rho_K^n$  всех мультиполей состояния отличны от нуля, и, соответственно, матрица плотности аксиально-симметрично поляризованного атома диагональна по проекциям момента m [3]. Состояние поляризованного атома в этом случае представляет собой некогерентную смесь состояний с различными значениями проекции момента m на направление **n**. Данный тип поляризации, очевидно, возникает, когда внешнее поляризующее воздействие является аксиально-симметричным. Средний момент атома **j** при аксиально-симметричной поляризации коллинеарен вектору **n** и связан с ориентацией  $\rho_1^n$  соотношением

$$\rho_1^n \mathbf{n} = \sqrt{3} \left[ (2j_1 + 1)(j_1 + 1)j_1 \right]^{-1/2} \mathbf{j}.$$
 (1)

Сразу же отметим, что все формулы, полученные для случая аксиально-симметричной поляризации, которые описывают ориентационные эффекты, сохраняют свой вид и в общем случае несимметричной поляризации атома. При этом вектор **n** в соответствии с (1) является единичным вектором, коллинеарным среднему моменту **j** ориентированного атома. В системе координат с осью z, направленной вдоль **n**, компоненты мультиполя состояния 1-го ранга  $\rho_{1,\pm 1} = 0$ . Однако ненулевые компоненты старших мультиполей состояния, вообще говоря, отличны от нуля, так что матрица плотности атома не будет диагональна по  $m^{1}$ .

Итак, воспользуемся полученным в работе [6] выражением для дифференциального сечения рассеяния света поляризованным атомом:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = (4\pi)^{1/2} \omega \omega'^3 \alpha^4 \sum_{K,k,k'} \rho_K^n (-1)^{j_1+j_2+k+K} \times \\
\times \left\{ \begin{array}{cc} k & k' & K \\ j_1 & j_1 & j_2 \end{array} \right\} (2K+1)^{-1/2} T_k T_{k'}^* \times \\
\times \sum_Q Y_{KQ}^*(\mathbf{n}) \left\{ \{\mathbf{e}'^* \otimes \mathbf{e}\}_k \otimes \{\mathbf{e}' \otimes \mathbf{e}^*\}_{k'} \}_{KQ} . \quad (2)$$

Здесь  $\omega(\omega')$  — частота, а е (е') — единичный вектор поляризации падающего (рассеянного) света,  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры (используется атомная система единиц),

$$T_k = \langle \nu_2 j_2 \parallel t_k \parallel \nu_1 j_1 \rangle, \quad k = 0, 1, 2,$$

 приведенные матричные элементы неприводимых частей тензора рассеяния, возникающие при отделении зависимости от магнитных квантовых чисел в

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup> Исключение составляет случай  $j_1 = 1/2$ , когда система характеризуется только одним мультиполем состояния ненулевого ранга  $\rho_{1Q}$ , и поляризация сводится к ориентации. Направление оси z по вектору **п** при этом автоматически диагонализует матрицу плотности системы.

неприводимых компонентах тензора рассеяния  $t_{kq}$ с помощью теоремы Вигнера–Эккарта. Набор атомных квантовых чисел в начальном и конечном состояниях (кроме момента и его проекции) обозначается как  $\nu_{1,2}$ . В формулу (2) также входят сферическая функция  $Y_{KQ}(\mathbf{n})$  и неприводимые тензоры, составленные из векторов поляризаций. Неприводимый тензор K-го ранга, составленный из неприводимых тензоров  $A_{k_1q_1}$  и  $B_{k_2,q_2}$  рангов  $k_1$  и  $k_2$ , определяется следующим образом:

$$\{A_{k_1} \otimes B_{k_2}\}_{KQ} = \sum_{q_1,q_2} C^{KQ}_{k_1q_1k_2q_2} A_{k_1q_1} B_{k_2q_2},$$

где  $C_{k_1q_1k_2q_2}^{KQ}$  — коэффициент Клебша–Гордана. Для вектора а имеем  $a_{1q} = a_q$ , где  $a_q$  — его сферические компоненты:

$$a_0 = a_z, \quad a_{\pm 1} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left( a_x \pm i a_y \right)$$

Неприводимые компоненты тензора рассеяния имеют вид

$$t_{kq} = \sum_{q_1,q_2} C_{k_1q_1k_2q_2}^{kq} \times \\ \times \left( d_{q_1} \hat{G}_{E_1+\omega} d_{q_2} + d_{q_2} \hat{G}_{E_1-\omega'} d_{q_1} \right), \quad (3)$$

где  $d_q$  — сферические компоненты дипольного момента атома,

$$\hat{G}_E = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E_n - E - i0} \tag{4}$$

— резольвента атомного гамильтониана,  $E_1$  — энергия атома в начальном состоянии.

Предположим, что атом только ориентирован, т. е.  $\rho_{K>1}^n = 0$ . Представим сечение рассеяния света (2) в компактной форме, содержащей скалярные и векторные произведения векторов поляризации е и е', единичных векторов k и k', задающих направления распространения падающего и рассеянного фотонов, и единичного вектора n, коллинеарного среднему моменту j ориентированного атома. Запишем дифференциальное сечение рассеяния света ориентированным атомом в виде суммы двух членов:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = \frac{d\sigma^{(unp)}}{d\Omega'} + \frac{d\sigma^{(or)}}{d\Omega'} \,. \tag{5}$$

Здесь

$$\frac{d\sigma^{(unp)}}{d\Omega'} = \frac{\omega \omega'^3 \alpha^4}{2j_1 + 1} \times \\
\times \left\{ \frac{1}{3} |T_0|^2 |\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}|^2 + \frac{1}{6} |T_1|^2 \left( 1 - |\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}|^2 \right) + \\
+ \frac{1}{10} |T_2|^2 \left( 1 + |\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}|^2 - \frac{2}{3} |\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}|^2 \right) \right\} \quad (6)$$

— сечение рассеяния света неполяризованным атомом (см. [6], [9, § 60]), состоящее из скалярной, антисимметричной и симметричной частей. Присутствие каждой из этих частей, пропорциональных квадратам модулей приведенных матричных элементов  $T_k$ соответствующих неприводимых частей тензора рассеяния, k = 0, 1, 2, возможно только при выполнении условия треугольника  $\Delta(j_1, j_2, k)$ . Второе слагаемое в (5), пропорциональное  $\rho_1^n$ , определяет добавку к сечению, обусловленную ориентацией атома.

Сферическая функция  $Y_{1Q}(\mathbf{n})$  пропорциональна сферической компоненте единичного вектора:

$$Y_{1Q}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \, n_Q.$$

Поэтому при K = 1 сумма по Q в выражении (2) представляет собой скалярное произведение вектора **n** и вектора (неприводимого тензора 1-го ранга), составленного из векторов поляризации:

$$\sum_{Q} (-1)^{Q} Y_{1-Q}(\mathbf{n}) \left\{ \{\mathbf{e}^{\prime *} \otimes \mathbf{e} \}_{k} \otimes \{\mathbf{e}^{\prime} \otimes \mathbf{e}^{*} \}_{k'} \right\}_{1Q} =$$
$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left( \mathbf{n} \cdot \left\{ \{\mathbf{e}^{\prime *} \otimes \mathbf{e} \}_{k} \otimes \{\mathbf{e}^{\prime} \otimes \mathbf{e}^{*} \}_{k'} \right\}_{1} \right). \quad (7)$$

Для всех возможных наборов чисел k и k' (k = 0, k' = 1; k = 1, k' = 0; k = k' = 1; k = 1, k' = 2; k = 2, k' = 1; k = k' = 2) скаляры (7) можно выразить через скалярные и векторные произведения входящих в них векторов, используя формулы из справочника [10]. После выделения всех векторных комбинаций выражение для второго ориентационного слагаемого в (5) записывается следующим образом:

$$\frac{d\sigma^{(or)}}{d\Omega'} = \omega \omega'^3 \alpha^4 \rho_1^n \left\{ a_+ \eta_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} + a_- \eta'_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}' - b_+ \eta_2 \operatorname{Re}\left[ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}') (\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}'^*) \right] - b_- \eta'_2 \operatorname{Re}\left[ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}) (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}^*) \right] + c \mathbf{n} \operatorname{Re}\left[ [\mathbf{e}'^* \times \mathbf{e}] (\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}^*) \right] + d\eta_2 \eta'_2 \mathbf{n} \cdot [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}] \right\}.$$
(8)

Здесь

$$\eta_2 = i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*] \tag{9}$$

имеет смысл степени циркулярной поляризации падающего света. При правой (левой) циркулярной поляризации  $\eta_2 = \pm 1$ . Параметр  $\eta'_2$  определяется выражением, аналогичным (9):

$$\eta_2' = i\mathbf{k}' \cdot [\mathbf{e}' \times \mathbf{e}'^*].$$

Во избежание недоразумений отметим, что  $\eta'_2$  не является степенью циркулярной поляризации рассеянного фотона. Рассеянный свет, вообще говоря, находится в смешанном по поляризациям состоянии (является частично поляризованным), и его параметры Стокса нетрудно вычислить, используя формулы

(5), (6), (8) для сечения рассеяния. Коэффициенты  $a_{\pm}, b_{\pm}, c$  и d выражаются через 6*j*-символы и приведенные матричные элементы тензора рассеяния  $T_k$ :

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}} R_{10} - \frac{1}{\sqrt{30}} R_{12} \pm \frac{1}{\sqrt{10}} R_{22},$$

$$b_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}} R_{10} \pm \frac{1}{2\sqrt{2}} R_{11} + \sqrt{\frac{2}{15}} R_{12} \pm \frac{1}{2\sqrt{10}} R_{22}, \quad (10)$$

$$c = \sqrt{\frac{2}{3}} I_{10} - \sqrt{\frac{2}{15}} I_{12}, \quad d = \sqrt{\frac{3}{10}} I_{12},$$

$$R_{kk'} = (-1)^{j_1 + j_2} \begin{cases} j_2 & j_1 & k' \\ 1 & k & j_1 \end{cases} \operatorname{Re}(T_k T_{k'}^*),$$

$$I_{kk'} = (-1)^{j_1 + j_2} \begin{cases} j_2 & j_1 & k' \\ 1 & k & j_1 \end{cases} \operatorname{Im}(T_k T_{k'}^*).$$

Дифференциальное сечение (5), пропорциональное вероятности обнаружения рассеянного фотона в состоянии с определенной поляризацией е', дает наиболее полную информацию о рассеянии, позволяя предсказывать результат пропускания рассеянного в данном направлении света через поляризационный фильтр. Если же поляризация рассеянного света в эксперименте не регистрируется, то необходимо знать только угловое распределение рассеянного излучения. Для нахождения углового распределения дифференциальное сечение рассеяния (5) следует просуммировать по двум независимым поляризациям рассеянного фотона. Во всех векторных комбинациях, содержащих вектор е' в формулах (6) и (8), суммирование легко выполняется с помощью тождества [9, § 45]:

$$\sum_{\lambda} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}'_{\lambda}) (\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}'_{\lambda}^{*}) = [\mathbf{k}' \times \mathbf{a}] \cdot [\mathbf{k}' \times \mathbf{b}], \qquad (11)$$

а параметр  $\eta'_2$  после суммирования обращается в нуль. В результате для углового распределения рассеянного света получаем следующее выражение:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega'} = \frac{d\sigma_s^{(unp)}}{d\Omega'} + \frac{d\sigma_s^{(or)}}{d\Omega'}$$

где

$$\frac{d\sigma_s^{(unp)}}{d\Omega'} = \frac{\omega\omega'^3\alpha^4}{3(2j_1+1)} \left[ |T_0|^2 + \frac{1}{2}|T_1|^2 + \frac{7}{10}|T_2|^2 - \left( |T_0|^2 - \frac{1}{2}|T_1|^2 + \frac{1}{10}|T_2|^2 \right) |\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}|^2 \right] \quad (12)$$

— угловое распределение света, рассеянного неполяризованным атомом, а

$$\frac{d\sigma_s^{(or)}}{d\Omega'} = \omega \omega'^3 \alpha^4 \rho_1^n \left\{ (2a_+ - b_+)\eta_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} + b_+ \eta_2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') (\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}') + c \mathbf{n} \cdot \operatorname{Re}\left( [\mathbf{e}^* \times \mathbf{k}'] (\mathbf{e} \cdot \mathbf{k}') \right) \right\}$$
(13)

565

 добавка к угловому распределению, обусловленная ориентацией атома.

Интегрируя угловое распределение с помощью известных тождеств

$$\int k'_i d\Omega' = 0, \quad \int k'_i k'_j d\Omega' = \frac{4\pi}{3} \delta_{ij}$$

по всем направлениям рассеяния, найдем полное сечение рассеяния света ориентированным атомом:

$$\sigma = 8\pi\omega\omega'^{3}\alpha^{4} \left\{ \frac{1}{9(2j_{1}+1)} \times \sum_{k=0}^{2} |T_{k}|^{2} + \rho_{1}^{n} \left(a_{+} - \frac{1}{3}b_{+}\right) \eta_{2} \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \right\}.$$
 (14)

Проанализируем полученные формулы на основании общих соображений симметрии. Ориентация  $\rho_1^n$  является *T*-нечетным (меняющим знак при обращении времени) псевдоскаляром, что непосредственно следует из соотношения (1), связывающего этот параметр со средним моментом ориентированного атома. С другой стороны, сечение рассеяния не должно меняться как при пространственной инверсии, так и при обращении времени. Поэтому Т-нечетными псевдоскалярами должны быть выражения в фигурных скобках (8) и (13). Степень циркулярной поляризации падающего света  $\eta_2$  (9) и параметр  $\eta'_2$  — псевдоскаляры, так что псевдоскалярность указанных выражений очевидна. В то же время при операции обращения времени, когда векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , определяющие направление распространения света, изменяют знак, а каждый вектор поляризации меняется на комплексно-сопряженный, псевдоскалярные комбинации векторов в двух последних слагаемых (8) и в последнем слагаемом (13) не меняются. Следовательно, Т-нечетными должны быть коэффициенты *с* и *d*, входящие в эти слагаемые.

Физической природой данной T-нечетности является диссипация световой энергии. Действительно, коэффициенты c и d пропорциональны величине Im $(T_k T_{k'}^*)$  (см. (10)), которая строго равна нулю при эрмитовом тензоре рассеяния (3). Антиэрмитова часть тензора рассеяния отлична от нуля только при открытом в процессе рассеяния света канале диссипации световой энергии и пропорциональна T-нечетному диссипативному параметру, определяющему скорость этой диссипации. На роль диссипативных процессов в рассеянии света неполяризованным атомом впервые было обращено внимание в работе [11]. Однако в случае неполяризованной системы диссипация проявляется только при учете неди-

польных эффектов. С другой стороны, при ориентации атома диссипативно-индуцированные эффекты проявляются уже в дипольном рассеянии [7].

Отметим, что эти эффекты должны наблюдаться при надпороговом рассеянии (энергия фотона выше порога ионизации атома или молекулы, либо порога диссоциации молекулы) и при резонансном рассеянии<sup>2)</sup>. При надпороговом рассеянии антиэрмитова часть тензора рассеяния появляется за счет антиэрмитовости резольвенты  $\hat{G}_{E_1+\omega}$  (4) при  $E_1 + \omega > 0$ , и Т-нечетным параметром является ионизационная (диссоционная) ширина исходного уровня. В случае резонансного рассеяния антиэрмитова добавка в тензоре рассеяния (3) возникает при введении ширины  $\Gamma$  резонансного уровня (*T*-нечетного параметра) в полюсную часть резольвенты. Резонансный уровень обязательно должен иметь мультиплетную структуру (при резонансе на синглете  $\text{Im}(T_k T_{k'}^*) = 0$ ), и диссипативно-индуцированные эффекты оказываются порядка  $\Gamma/\Delta$ , где  $\Delta$  имеет порядок тонкого расщепления резонансных подуровней. Разумеется, при радиационном уширении, когда  $\Gamma \sim \alpha^3$ , эти эффекты дают вклад порядка  $\alpha$ , однако их влияние должно возрастать при увеличении ширины резонансного уровня, например, за счет столкновений. Роль диссипативно-индуцированных эффектов в рассеянии света ориентированным атомом весьма существенна. При их отсутствии угловое распределение рассеянного света (см. (13)) может зависеть от ориентации атома только при ненулевой степени циркулярной поляризации падающего света  $\eta_2$ .

# 3. ВЫДЕЛЕНИЕ ЯВНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПАРАМЕТРОВ СТОКСА В СЕЧЕНИИ ПРОИЗВОЛЬНОГО ФОТОПРОЦЕССА

В случае частичной поляризации электромагнитной волны фотон находится в смешанном по поляризациям квантовомеханическом состоянии, которое следует задавать поляризационной матрицей плотности [3, 9]. Это эрмитова матрица второго порядка с единичным следом. Ее элементы можно выразить через три вещественных параметра, в качестве которых обычно берутся параметры Стокса  $\eta_i$ , i = 1, 2, 3. Параметр  $\eta_2$  определяет степень круговой поляризации, параметр  $\eta_3$  задает степень линейной поляризации вдоль осей x и y (ось z направлена вдоль распространения волны), а  $\eta_1$  — степень линейной поляризации вдоль осей p и q, повернутых в плоскости xy на угол  $45^{\circ}$  относительно осей x и y в положительном направлении. В общем случае  $\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 \leq 1$ . При  $\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 = 1$  фотон находится в состоянии чистой поляризации, которое можно задавать вектором е. В случае неполяризованного света  $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 0$ .

Явный вид поляризационной матрицы плотности, естественно, зависит от выбора базиса. В спиральном базисе, базисными векторами которого являются векторы  $e_{\pm}$  правой и левой циркулярных поляризаций фотона, элементы этой матрицы выражаются через параметры Стокса следующим образом [3]:

$$\begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} = = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \eta_2 & -\eta_3 + i\eta_1 \\ -\eta_3 - i\eta_1 & 1 - \eta_2 \end{pmatrix}.$$
 (15)

Векторы  $\mathbf{e}_{\pm}$  связаны с векторами линейной поляризации вдоль осей x и y,  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ , образующими базис плоской декартовой системы координат:

$$\mathbf{e}_{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mathbf{e}_x \pm i \mathbf{e}_y \right). \tag{16}$$

В данном декартовом базисе матрица плотности записывается в виде [9,12]

$$\begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\eta_3 & \eta_1 - i\eta_2 \\ \eta_1 + i\eta_2 & 1-\eta_3 \end{pmatrix}.$$
 (17)

Покажем, что в выражении для сечения любого фотопроцесса, сопровождающегося поглощением или вынужденным излучением одного частично поляризованного фотона, содержится сумма произведений параметров Стокса на соответствующие дихроизмы процесса: круговой дихроизм и два линейных дихроизма.

Если фотон находится в состоянии чистой поляризации с вектором поляризации **e**, то в первом неисчезающем порядке теории возмущений матричный элемент перехода линеен по **e**. Поэтому сечение (полное или дифференциальное) фотопроцесса имеет следующую структуру:

$$\sigma(\mathbf{e}) \propto |\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}|^2, \tag{18}$$

где вектор **A** не зависит от поляризации света. Суммирование (усреднение) по атомным квантовым числам, например магнитным, которое можно провести

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup> Диссипативные эффекты, связанные с радиационными поправками, вне области резонанса пренебрежимо малы [11], а при резонансном рассеянии их главная часть учитывается введением радиационной ширины резонансного уровня.

и после перехода к частичной поляризации света, не изменяет дальнейших рассуждений. Переход к частичной поляризации фотона состоит в усреднении сечения (18) по различным реализациям поляризации е и сводится к формальной замене

$$e_j e_{j'}^* \to \sum_{\lambda,\lambda'} \rho_{\lambda\lambda'} e_{\lambda j} e_{\lambda' j'}^*,$$
 (19)

где  $\rho_{\lambda\lambda'}$  — элементы поляризационной матрицы плотности фотона в базисе  $\{\mathbf{e}_{\lambda}\}$ , а  $e_j$  — декартовы компоненты векторов поляризации<sup>3)</sup>. В результате сечение фотопроцесса представляется в известном виде [3, 9]:

$$\sigma \propto \sum_{\lambda,\lambda'} \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_{\lambda} \rho_{\lambda\lambda'} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_{\lambda'})^*.$$
 (20)

Явный вид поляризационной матрицы плотности  $\rho_{\lambda\lambda'}$  в спиральном базисе (15) показывает, что параметр Стокса  $\eta_2$  в выражении для сечения (20) умножается на разность сечений для правой и левой циркулярных поляризаций фотона (круговой дихроизм процесса), а из (17) следует, что  $\eta_3$  умножается на линейный дихроизм. Таким образом, сечение фотопроцесса имеет следующую структуру:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{1}{2}(\eta_1 \sigma_{pq} + \eta_2 \sigma_{+-} + \eta_3 \sigma_{xy}), \qquad (21)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sigma(\mathbf{e}_{\lambda}) \tag{22}$$

 сечение фотопроцесса с участием неполяризованного фотона,

$$\sigma_{+-} = \sigma(\mathbf{e}_{+}) - \sigma(\mathbf{e}_{-})$$

 разность сечений для правой и левой циркулярных поляризаций,

$$\sigma_{xy} = \sigma(\mathbf{e}_x) - \sigma(\mathbf{e}_y)$$

— разность сечений для линейной поляризации вдоль осей x и y (линейный xy-дихроизм процесса),  $\sigma_{pq}$  — линейный pq-дихроизм процесса. Сечение (20) легко также привести к виду (21), если, выразив базисные векторы  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$  через базис повернутой на 45° системы координат pq,

$$\mathbf{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_p - \mathbf{e}_q), \quad \mathbf{e}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_p + \mathbf{e}_q),$$

и используя (16), записать сумму (19) в виде

$$\sum_{\lambda'} \rho_{\lambda\lambda'} e_{\lambda j} e_{\lambda' j'} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} e_{\lambda j} e_{\lambda j'}^* + \frac{1}{2} \eta_2 (e_{+j} e_{+j'}^* - e_{-j} e_{-j'}^*) + \frac{1}{2} \eta_3 (e_{xj} e_{xj'} - e_{yj} e_{yj'}) + \frac{1}{2} \eta_1 (e_{pj} e_{pj'} - e_{qj} e_{qj'}).$$

Симметричная часть матрицы (17),

$$\frac{1}{2} \left( \begin{array}{cc} 1+\eta_3 & \eta_1 \\ \eta_1 & 1-\eta_3 \end{array} \right) +$$

приводится к диагональному виду

$$\frac{1}{2} \left( \begin{array}{cc} 1+\tilde{\eta}_3 & 0\\ 0 & 1-\tilde{\eta}_3 \end{array} \right)$$

поворотом координатных осей. Здесь параметр

$$\tilde{\eta}_3 = (\eta_1^2 + \eta_3^2)^{1/2},$$

называемый степенью линейной поляризации света [12], имеет смысл степени линейной поляризации вдоль осей  $\tilde{x}, \tilde{y}$ , повернутых на угол  $\varphi$  относительно осей x, y,

$$\cos 2\varphi = \eta_3/\tilde{\eta}_3, \quad \sin 2\varphi = \eta_1/\tilde{\eta}_3.$$

Состояние частичной поляризации фотона задается при этом тремя параметрами:  $\eta_2$ ,  $\tilde{\eta}_3$  и  $\varphi$ . Параметр Стокса  $\tilde{\eta}_1$  в повернутой системе координат, очевидно, равен нулю, так что в скобках выражения (21) исчезает первое слагаемое. В работе [14] именно в таком виде представлена зависимость сечения двухэлектронной фотоионизации от параметров Стокса.

Подчеркнем, что формула (21) имеет универсальный характер и справедлива для дифференциального или полного сечения любого фотопроцесса, а также для вероятности перехода, стимулируемого поглощением или вынужденным излучением частично поляризованного фотона.

## 4. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЧНО ПОЛЯРИЗОВАННОГО СВЕТА

В соответствии с (21) для перехода от чистой к частичной поляризации падающего света необходимо получить выражение для сечения рассеяния неполяризованного света, а также для кругового и линейного дихроизмов процесса. Линейный дихроизм можно найти, подставив соответствующие вещественные векторы линейной поляризации в формулы для сечения. Переход к неполяризованному

<sup>&</sup>lt;sup>3)</sup> Отметим, что частичная поляризация электромагнитной волны не может задаваться поляризационной матрицей плотности фотона, если рассчитывается сечение процесса с поглощением (излучением)  $N \ge 2$  фотонов. Количество необходимых поляризационных параметров в этих случаях оказывается больше трех и зависит от N [13].

свету состоит в усреднении выражений (6) и (8) по двум ортогональным векторам поляризации (см. (22)). При усреднении слагаемые, содержащие параметр  $\eta_2$ , исчезают, а усреднение остальных слагаемых, в которые входит вектор **е**, легко выполняется с помощью тождества, аналогичного (11).

При нахождении кругового дихроизма в слагаемых (8), которые содержат степень циркулярной поляризации  $\eta_2$  для чисто поляризованного света, параметр  $\eta_2$  заменится на 2. В результате эти слагаемые войдут в (21) без изменений, но  $\eta_2$  уже будет иметь смысл степени циркулярной поляризации частично поляризованного света. При определении вклада в круговой дихроизм других слагаемых, зависящих от е в (6) и (8), удобно использовать следующее тождество:

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_{\pm})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_{\pm}) = \frac{1}{2} \left\{ [\mathbf{k} \times \mathbf{a}] \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{b}] \pm i [\mathbf{b} \times \mathbf{a}] \cdot \mathbf{k} \right\}.$$

Приведем окончательное выражение для сечения рассеяния частично поляризованного света ориентированным атомом. Сечение записывается в форме (5), при этом слагаемые имеют следующий вид:

$$\frac{d\sigma^{(unp)}}{d\Omega'} = \frac{\omega\omega'^{3}\alpha^{4}}{6(2j_{1}+1)} \times \\
\times \left\{ |T_{0}|^{2} + \frac{1}{2}|T_{1}|^{2} + \frac{7}{10}|T_{2}|^{2} - T|\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}'|^{2} + 
+ \eta_{2}\eta'_{2} \left( |T_{0}|^{2} + \frac{1}{2}|T_{1}|^{2} - \frac{1}{2}|T_{2}|^{2} \right) \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' + 
+ \eta_{1}\Delta^{(unp)}_{pq} + \eta_{3}\Delta^{(unp)}_{xy} \right\}, \quad (23)$$

где

$$T = |T_0|^2 - \frac{1}{2}|T_1|^2 + \frac{1}{10}|T_2|^2,$$
  
$$\Delta^{(unp)}_{\beta\gamma} = T\left(|\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_{\beta}|^2 - |\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_{\gamma}|^2\right);$$

$$\frac{d\sigma^{(or)}}{d\Omega'} = \frac{1}{2}\omega\omega'^{3}\alpha^{4}\rho_{1}^{n} \left\{ (2a_{-} - b_{-})\eta'_{2}\mathbf{n}\cdot\mathbf{k}' + b_{-}\eta'_{2}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{k})(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{k}) + c\mathbf{n}\cdot\operatorname{Re}\left[[\mathbf{k}\times\mathbf{e}'^{*}](\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}')\right] + 2\eta_{2}\left(a_{+}\mathbf{n}\cdot\mathbf{k} - b_{+}\operatorname{Re}\left[(\mathbf{n}\cdot\mathbf{e}')(\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}'^{*})\right] + \left(d + \frac{1}{4}c\right)\eta'_{2}\mathbf{n}\cdot[\mathbf{k}'\times\mathbf{k}]\right) + \eta_{1}\Delta_{pq}^{(or)} + \eta_{3}\Delta_{xy}^{(or)}\right\}, \quad (24)$$

где

$$\Delta_{\beta\gamma}^{(or)} = c\mathbf{n} \cdot \operatorname{Re}\left( [\mathbf{e}' \times \mathbf{e}_{\beta}] (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}_{\beta}) - [\mathbf{e}' \times \mathbf{e}_{\gamma}] (\mathbf{e}'^* \cdot \mathbf{e}_{\gamma}) \right) - b_{-} \eta_{2}' \mathbf{n} \cdot \left( \mathbf{e}_{\beta} (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}_{\beta}) - \mathbf{e}_{\gamma} (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}_{\gamma}) \right).$$

Угловое распределение рассеянного света можно получить, суммируя выражения (23) и (24) по его поляризациям или переходя от углового распределения, полученного для чистой поляризации падающего света (см. (12), (13)), к частичной поляризации с помощью (21). В результате для углового распределения излучения, рассеянного неполяризованными атомами, и для добавки, обусловленной ориентацией, получаются следующие выражения:

$$\frac{d\sigma_s^{(unp)}}{d\Omega'} = \frac{\omega\omega'^3 \alpha^4}{6(2j_1+1)} \left\{ |T_0|^2 + \frac{3}{2}|T_1|^2 + \frac{13}{10}|T_2|^2 + T(\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}')^2 + \eta_1\delta_{pq}^{(unp)} + \eta_3\delta_{xy}^{(unp)} \right\}, \quad (25)$$

где

$$\delta^{(unp)}_{\beta\gamma} = T \left[ (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}_{\gamma})^2 - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{e}_{\beta})^2 \right];$$

$$\frac{d\sigma_s^{(or)}}{d\Omega'} = \frac{1}{2}\omega\omega'^3\alpha^4\rho_1^n \left\{ c\mathbf{n} \cdot [\mathbf{k}' \times \mathbf{k}] (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) + 2\eta_2 \left[ (2a_+ - b_+)\mathbf{n} \cdot \mathbf{k} + b_+ (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}') \right] + \eta_1 \delta_{pq}^{(or)} + \eta_3 \delta_{xy}^{(or)} \right\}, \quad (26)$$

где

$$\delta^{(or)}_{\beta\gamma} = c \mathbf{n} \cdot \left( [\mathbf{e}_{\beta} \times \mathbf{k}'] (\mathbf{e}_{\beta} \cdot \mathbf{k}') - [\mathbf{e}_{\gamma} \times \mathbf{k}'] (\mathbf{e}_{\gamma} \cdot \mathbf{k}') \right).$$

Формула (14) для полного сечения рассеяния света ориентированным атомом, полученная для случая чистой поляризации, сохраняет свой вид при переходе к частичной поляризации падающего излучения.

#### 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные в данной работе формулы позволяют ют легко проанализировать любые эффекты, наблюдаемые в процессе рассеяния света произвольной поляризации ориентированными атомами. Рассмотрим некоторые из них.

Прежде всего отметим, что при поляризации атома в состоянии с  $j_1 > 1/2$  отличны от нуля не только ориентация  $\rho_1^n$ , но и следующие мультиполи состояния до ранга  $2j_1$  включительно. Например, если  $j_1 = 1$ , то при поляризации, вообще говоря, индуцируются как ориентация, так и выстраивание. Старшие мультиполи состояния могут не возбуждаться вследствие определенных правил отбора для поляризующего атом внешнего воздействия. Так, при дипольном поглощении света индуцируются только ориентация и выстраивание. В общем случае в дифференциальное сечение рассеяния света (2) дают вклад, кроме ориентации, еще три мультиполя состояния [6], так что полученные выше формулы определяют только ориентационную часть сечения рассеяния света поляризованным атомом. Тем не менее в тех случаях, когда атом поляризован аксиально-симметрично и индуцированы только ориентация и выстраивание, ориентационные эффекты могут наблюдаться в чистом виде, так как разность сечений для двух противоположных направлений вектора **n** зависит только от ориентации атома.

Ориентация атома существенным образом влияет на поляризацию рассеянного света. Формулы (23) и (24) позволяют вычислить параметры Стокса рассеянного излучения и определить состояние его поляризации. Так, степень циркулярной поляризации рассеянного света (второй параметр Стокса) равна отношению разности сечений для  $\eta_2' = \pm 1$  к угловому распределению. Как следует из (23) и (24), при  $\eta_2 = 0$  ненулевая степень циркулярной поляризации рассеянного света индуцируется только за счет ориентации атома, когда система характеризуется псевдоскалярным параметром  $\rho_1^n$ . Кроме того, при  $\eta_2 = 0$  и  $\eta'_2 = 0$  (регистрируется линейно поляризованный фотон) обусловленная ориентацией добавка (24) к сечению оказывается отличной от нуля за счет слагаемых, пропорциональных Т-нечетному коэффициенту с. Это означает, что при нулевой степени циркулярной поляризации падающего света степень линейной поляризации рассеянного света зависит от ориентации атома из-за диссипативных эффектов, которые проявляются либо при надпороговом, либо при резонансном рассеянии (см. [7] и обсуждение в конце разд. 2 настоящей статьи).

Угловое распределение излучения, рассеянного неполяризованным атомом, (25) не зависит от степени циркулярной поляризации  $\eta_2$  падающего света, что совершенно естественно, так как  $\eta_2$  — псевдоскаляр, а из векторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  нельзя составить псевдоскалярную комбинацию. Так же естественно возникновение зависимости углового распределения от  $\eta_2$  при ориентации атома (см. (26)). В отсутствие диссипативных эффектов (коэффициент c = 0) ориентационная часть сечения (26) пропорциональна параметру Стокса  $\eta_2$ , так что зависимость углового распределения рассеянного излучения от ориентации атома возникает только при ненулевой степени циркулярной поляризации падающего света, как и при рассеянии фотона на свободном поляризованном электроне [9, § 87]. Эта зависимость сохраняется и в полном сечении (14). Однако эффекты диссипации световой энергии, проявляющиеся при рассеянии света атомом (рассеянии на связанных электронах), приводят к зависимости углового распределения от ориентации и при  $\eta_2 = 0$ . Эти эффекты приводят также к зависимости ориентационной добавки к угловому распределению рассеянного излучения (26) от степеней линейной поляризации исходного излучения  $\eta_1$ ,  $\eta_3$  и к зависимости углового распределения от ориентации атома в случае рассеяния неполяризованного света [7].

Полученные в настоящей работе выражения для сечений (23)–(26) и (14) дают полное решение задачи о дипольном рассеянии света произвольной поляризации ориентированной квантовой системой.

# ЛИТЕРАТУРА

- 1. Г. В. Скроцкий, Т. Г. Изюмова, УФН 73, 423 (1961).
- 2. W. Happer, Rev. Mod. Phys. 44, 169 (1972).
- **3.** К. Блум, *Теория матрицы плотности и ее прило*жения, Мир, Москва (1983).
- 4. H. Klar and H. Kleinpoppen, J. Phys. B 15, 933 (1982).
- N. A. Cherepkov and V. V. Kuznetsov, J. Phys. B 22, L405 (1989).
- 6. М. Я. Агре, Л. П. Рапопорт, ЖЭТФ 104, 2975 (1993).
- M. Ya. Agre and N. L. Manakov, J. Phys. B 29, L7 (1996).
- 8. М. Я. Агре, ЖЭТФ 110, 2018 (1996).
- 9. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980).
- Д. В. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, Квантовая теория углового момента, Наука, Москва (1975).
- 11. Н. Л. Манаков, ЖЭТФ 106, 1286 (1994).
- **12**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973), § 50.
- 13. М. Я. Агре, Опт. и спектр. 89, 485 (2000).
- 14. S. J. Schaphorst, B. Krässig, O. Schwarzkopf et al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 76, 229 (1995).