

Д.Ю. Загурский, И.Г. Захарова, В.А. Трофимов

КОНСЕРВАТИВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА, ОПИСЫВАЮЩИХ НЕСТАЦИОНАРНЫЙ НЕЛИНЕЙНЫЙ ОТКЛИК ВЕЩЕСТВА В ПОЛУКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ*

1. Введение

В настоящее время взаимодействие фемтосекундных (малопериодных) импульсов со средой представляет собой одну из актуальных проблем [1-12]. Этот интерес объясняется, во-первых, тем, что их малая длительность позволяет изучать различные сверхбыстрые процессы. Во-вторых, в таких импульсах может достигаться высокая интенсивность, так что их электрическое поле может превосходить внутриатомное, и электрическое поле атома может рассматриваться как возмущение поля импульса. Имеются также и другие специфические черты, присущие только этим импульсам. Так, например, отклик среды зависит от абсолютной фазы малопериодного фемтосекундного импульса [6,7]. Если длительность импульса не превышает некоторого критического значения, то отклик среды происходит на собственной частоте среды даже при условии, что частота оптического излучения достаточно далека от нее. Имеют место и гистерезисные зависимости наиболее яркой спектральной амплитуды отклика среды от амплитуды воздействующего импульса (эти явления изучались, в частности, в [9,12]). Для малопериодного импульса становится несправедливым широко используемая модель Дуффинга для описания отклика среды [13]. Более того, при распространении малопериодного оптического импульса в среде с насыщающимся потенциалом возможно появление высокочастотных субимпульсов [14].

В отличие от оптического излучения, которое преимущественно возбуждает электронные колебания в атомах или молекулах, терагерцовые (ТГц) волны возбуждают низкоэнергетические моды. Сюда относятся вращения молекул [15], колебания решетки [16], спиновые волны [17].

* Исследование выполнено за счет гранта Российского Научного Фонда (проект №14-21-00081)

Данная особенность обуславливает привлекательность ТГц волн для практического применения: многие широко распространенные материалы прозрачны для них, в то время как более редкие и подлежащие контролю вещества имеют характерные спектральные линии поглощения в ТГц диапазоне частот. Поэтому использование ТГц волн может позволить реализовать бесконтактное детектирование определенных веществ в реальных условиях.

Для теоретического изучения взаимодействия ТГц импульсов с веществом часто используется так называемый квазиклассический подход. Это означает, что электромагнитное поле представляется как изменяющееся во времени и пространстве классическое поле, а для описания среды привлекается квантовая механика. Такая составная модель позволила предсказать и осмыслить ряд необычных, неклассических оптических эффектов, таких как адиабатическое следование (adiabatic following) [18], индуцированная прозрачность [19, 20], медленный свет [19, 21], быстрый свет [22] и т.д.

В настоящей работе на основе полуклассической модели изучается распространение ТГц импульсов в нелинейной среде конечной длины. Для используемой модели адаптируется известная конечно-разностная схема в пространственно-временной области [23]. Показана консервативность построенной схемы. На ее основе проводится математическое моделирование с целью исследования влияния ширины спектра импульса, его начальной фазы, а также длины среды на процесс поглощения и эмиссии излучения. Демонстрируется каскадный механизм возбуждения высоких энергетических уровней.

2. Постановка задачи

В настоящей работе анализируется следующий процесс взаимодействия электромагнитного поля со средой. В начальный момент времени электромагнитный импульс находится слева от слоя среды конечной длины (Рис. 1). Для практики представляет интерес сравнение спектров отраженного и прошедшего сигналов со спектром исходного сигнала. Чтобы выявить физический механизм его изменения при взаимодействии им-

пульса со средой ниже анализируется эволюция матрицы плотности в нескольких сечениях среды.

Взаимодействие электромагнитного импульса со средой в данной работе описывается системой уравнений Максвелла:

$$-\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}, \quad -\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t}, \quad D = E + 4\pi P, \quad (1)$$

где H, E – напряженности магнитного и электрического полей, D – электрическая индукция, z – координата, вдоль которой происходит распространение излучения, t – время, c – скорость света. Эволюция среды описывается в рамках формализма матрицы плотности [24]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho]. \quad (2)$$

В уравнении (2) \hbar – редуцированная постоянная Планка, ρ – матрица плотности, описывающая состояние системы, \hat{H} – гамильтониан взаимодействия поля со средой:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - (\hat{d} \cdot E(t, z)). \quad (3)$$

\hat{H}_0 – оператор собственной энергии молекул среды, который определяет стационарные состояния системы и волновые функции, \hat{d} – оператор дипольного момента системы. В поэлементной записи уравнения для матрицы плотности с учетом релаксационных процессов, имеют вид:

$$\frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} + (\gamma_{mn} + i\omega_{mn})\rho_{mn} = \frac{i}{\hbar} E \sum_q (d_{mn}\rho_{qn} - \rho_{mq}d_{qn}), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} + \sum_q (W_{mq}\rho_{mm} - W_{qm}\rho_{qq}) = \frac{i}{\hbar} E \sum_q (d_{mn}\rho_{qm} - \rho_{mq}d_{qm}), \quad (5)$$

где

$$\gamma_{mn} = \sum_q \frac{(W_{qm} + W_{qn})}{2}, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}. \quad (6)$$

γ_{mn} – скорость релаксации недиагональных элементов, W_{qm} – вероятность релаксационного перехода. Подчеркнем, что диагональные элементы матрицы плотности ρ_{mm} (заселенности уровней) имеют смысл числа молекул в соответствующем энергетическом состоянии.

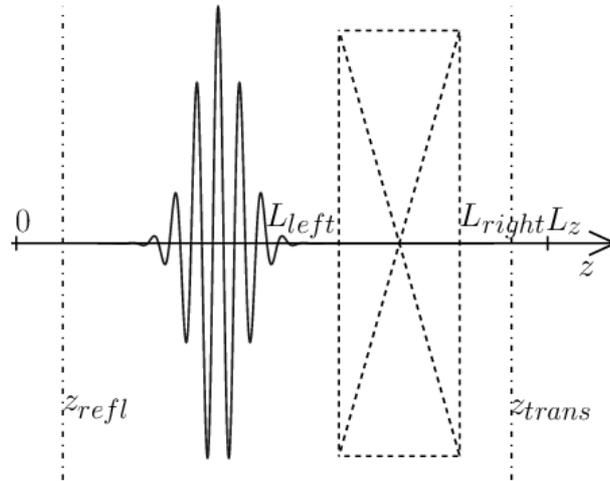


Рис. 1. Схема компьютерного эксперимента. Сплошной линией обозначено начальное положение импульса, пунктиром – границы слоя среды (L_{left}, L_{right}). Вертикальные штрихпунктирные линии (z_{refl}, z_{trans}) обозначают положения “детекторов”, которые регистрируют временные зависимости прошедшего и отраженного импульса.

Обратное воздействие среды на поле осуществляется через поляризацию среды, определяемую как среднее значение дипольного момента объема, вычисляемое по следующей формуле:

$$P = N \cdot \text{Trace}(\hat{d}\rho). \quad (7)$$

где N – концентрация атомов\молекул вещества.

Уравнения (2)-(7) решаются в области локализации вещества $z \in (L_{left}; L_{right})$, а уравнения (1) – в области $z \in (0; L_z)$, где L_z – размер области расчета. Очевидно что, вне среды $P = 0; E = D$.

Начальное распределение поля задается следующим образом:

$$E(z, t = 0) = H(z, t = 0) = E_0 \cdot \exp(-(z - z_p)^2 / a_z^2) \cdot \cos(\omega_p \cdot (z - z_p)), \quad (8)$$

где a_z – характерная длительность импульса в вакууме, z_p – начальное положение его центра, ω_p – несущая частота, E_0 – амплитуда импульса.

Среда в начальный момент времени находится в основном состоянии:

$$\rho_{11}(t = 0, z) = 0, \quad (9)$$

$$\rho_{mn}(t = 0, z) = 0, \quad m \neq 1, \quad n \neq 1. \quad (10)$$

На границе области расчета, уравнения (1) заменяются условиями:

$$\frac{\partial D}{\partial z} \pm \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial H}{\partial z} \pm \frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t} = 0, \quad (11)$$

где знак «+» соответствует условию на правой границе области ($z = L_z$), а знак «-» – на её левой ($z = 0$). Это условие соответствует одностороннему распространению волны.

Описание взаимодействия электромагнитного излучения с веществом в рамках уравнений (1)-(7) называется квазиклассическим, поскольку среда описывается уравнениями квантовой механики, а эволюция электромагнитного поля – уравнениями Максвелла. Выше отклик среды на электромагнитное поле описывается в дипольном приближении, справедливом для длин волн превышающих размеры молекул. Элементы d_{ii} матрицы дипольных моментов считаются равными нулю, что соответствует отсутствию собственного дипольного момента у молекул.

Уравнения (1)-(11) приводятся к безразмерному виду следующими преобразованиями:

$$\begin{aligned} z &= \frac{c}{\omega_0} z', & t &= \frac{1}{\omega_0} t', & \omega_{mn} &= \omega_0 \omega'_{mn}, & \omega_p &= \omega_0 \omega'_p, \\ W_{mn} &= \omega_0 W'_{mn}, & d &= d_0 d', & P &= N d_0 P', & \gamma_{mn} &= \omega_0 \gamma'_{mn}, \\ D &= 4\pi N d_0 D', & H &= 4\pi N d_0 H', & \alpha &= \frac{4\pi N d_0^2}{\hbar \omega_0}, & E &= 4\pi N d_0 E', \\ a_z &= \frac{c}{\omega_0} \tau_p, \end{aligned}$$

где ω_0 – характерная частота, равная 1 ТГц, N – плотность молекул вещества, d_0 -характерный дипольный момент равный 10^{-18} ед. СГС (1 Де-

бай). В таблице 1 приведены значения физических величин и безразмерных коэффициентов, использованных в расчетах.

Таблица 1. Характерные физические величины и значения коэффициентов, использованных в расчетах.

Величина	Физическая характеристика	Значение
N	Концентрация молекул среды	$5.670 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$
d_0	Дипольный момент одной молекулы	$10^{-18} \text{ см}^{2.5} \Gamma^{0.5} \text{ с}^{-1}$
ω_0	Частота перехода.	10^{12} с^{-1}
c/ω_0	Единица длины.	0.03 см
$1/\omega_0$	Единица времени	10^{-12} с
Nd_0	Единица поляризации	$5.670 \cdot 10^3 \text{ см}^{-0.5} \Gamma^{0.5} \text{ с}^{-1}$
$4\pi Nd_0$	Единица напряженности	$7.126 \cdot 10^4 \text{ см}^{-0.5} \Gamma^{0.5} \text{ с}^{-1}$
α	Коэффициент взаимодействия электромагнитного поля со средой	67.574

В безразмерных переменных уравнения (1)-(8),(11) имеют следующий вид, для удобства, штрихи у всех величин опущены:

$$-\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial D}{\partial t}, \quad -\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{\partial H}{\partial t}, \quad D = E + P, \quad P = \text{Trace}(\hat{d}\rho), \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} + (\gamma_{mn} + i\omega_{mn})\rho_{mn} = i\alpha E \sum_q (d_{mn}\rho_{qn} - \rho_{mq}d_{qn}), \quad (13)$$

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} + \sum_q (W_{mq}\rho_{mm} - W_{qm}\rho_{qq}) = i\alpha E \sum_q (d_{mn}\rho_{qm} - \rho_{mq}d_{qm}), \quad (14)$$

$$\frac{\partial D}{\partial z} \pm \frac{\partial D}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial H}{\partial z} \pm \frac{\partial H}{\partial t} = 0, \quad z = z_{refl}, z_{trans}, \quad (15)$$

$$E(z, t = 0) = H(z, t = 0) = E_0 \cdot \exp(-(z - z_p)^2 / \tau_p^2) \cdot \cos(\omega_p \cdot (z - z_p)), \quad (16)$$

где τ_p – безразмерная протяженность импульса в вакууме, совпадающая с его длительностью.

Проинтегрировав уравнения (12) по z можно получить следующие интегральные законы сохранения:

$$\int_{z_l}^{z_r} D(t, z) dz = I_1 - \int_0^t H(z_r, t) - H(z_l, t),$$

$$\int_{z_l}^{z_r} H(t, z) dz = I_2 - \int_0^t E(z_r, t) - E(z_l, t),$$
(17)

где I_1, I_2 – константы, соответствующие $t = 0$. В случае отсутствия электромагнитного поля на границе, выражения (17) преобразуются к известному виду:

$$\int_{z_l}^{z_r} D(t, z) dz = I_1 = const, \quad \int_{z_l}^{z_r} H(t, z) dz = I_2 = const.$$
(18)

3. Разностная схема.

Для численного решения системы уравнений Максвелла введем следующие разностные сетки:

$$\omega_t = \left\{ t_l = l \cdot \tau, l = \overline{0, N_t}, \tau = \frac{L_t}{N_t} \right\},$$
(19)

$$\tilde{\omega}_t = \left\{ t_{l-0.5} = (l-0.5) \cdot \tau, l = \overline{1, N_t}, \tau = \frac{L_t}{N_t} \right\},$$
(20)

$$\omega_z = \left\{ z_j = j \cdot h, j = \overline{0, N_z}, h = \frac{L_z}{N_z} \right\},$$
(21)

$$\tilde{\omega}_z = \left\{ z_{j+0.5} = (j+0.5) \cdot h, j = \overline{0, N_z - 1}, h = \frac{L_z}{N_z} \right\},$$
(22)

где L_z – размер области по координате z , L_t – временной интервал, в течение которого анализируется процесс взаимодействия, а N_z и N_t – число узлов по пространственной и временной координатам соответственно. Функция $H(t, z)$ аппроксимируется в узлах сетки $\tilde{\omega}_z \times \tilde{\omega}_t$, а функции $E(t, z)$, $D(t, z)$ и $\rho(t, z)$ – в узлах сетки $\omega_z \times \omega_t$. На Рис.2 изображен шаблон разностной схемы.

Для аппроксимации краевых условий использовался шаблон схемы “кабаре”[25]:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{D(t_{l+1}, z_{N_z}) - D(t_l, z_{N_z})}{\tau} + \frac{D(t_l, z_{N_z-1}) - D(t_{l-1}, z_{N_z-1})}{\tau} \right) + \frac{D(t_l, z_{N_z}) - D(t_l, z_{N_z-1})}{h} = 0, \quad (31)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{H(t_{l+0.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{N_z-0.5})}{\tau} + \frac{H(t_{l-0.5}, z_{N_z-1.5}) - H(t_{l-1.5}, z_{N_z-1.5})}{\tau} \right) + \quad (32)$$

$$\frac{H(t_{l-0.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{N_z-1.5})}{h} = 0, \quad l = \overline{2, N_t - 1},$$

на правой границе, и

$$\frac{1}{2} \left(\frac{H(t_{l+0.5}, z_{0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{0.5})}{\tau} + \frac{H(t_{l-0.5}, z_{1.5}) - H(t_{l-1.5}, z_{1.5})}{\tau} \right) - \frac{H(t_{l-0.5}, z_{1.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{0.5})}{h} = 0, \quad (33)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{D(t_{l+1}, z_1) - D(t_l, z_1)}{\tau} + \frac{D(t_l, z_2) - D(t_{l-1}, z_2)}{\tau} \right) - \frac{D(t_l, z_2) - D(t_l, z_1)}{h} = 0, \quad l = \overline{2, N_t - 1} \quad (34)$$

на левой границе области расчета. Поскольку уравнения (31)-(34) записаны на трех слоях по времени, то они неприменимы для определения граничных значений на втором шаге по времени. Учитывая финитность начального распределения электромагнитного поля в начальном импульсе:

$$E(t_1, z_j) = H(t_{0.5}, z_{j+0.5}) = E_0 \cdot \exp(-(z_j - z_p)^2 / a_z^2) \cdot \cos(\omega_p \cdot (z_j - z_p)), \quad (35)$$

$$j = 2, N_z - 3$$

$$E(t_1, z_j) = 0, \quad j = 0, 1, N_z - 1, N_z; \quad (36)$$

$$H(t_{0.5}, z_{j+0.5}) = 0, \quad j = 0, 1, N_z - 2, N_z - 1, l = 1,$$

граничные значения на втором шаге по времени имели нулевые значения:

$$H(t_{1.5}, z_{N_z-0.5}) = H(t_{1.5}, z_{0.5}) = D(t_2, z_1) = D(t_2, z_{N_z}) = 0. \quad (37)$$

Можно показать, что разностная схема (23)-(30) в узлах сетки аппроксимирует систему уравнений (12)-(14) со вторым порядком точности по обеим координатам, уравнения (31)-(34) аппроксимируют граничные условия со вторым порядком по времени и первым порядком по пространству.

Лемма 1. Разностная схема (23)-(34) консервативна, для нее имеют место разностные аналоги законов сохранения (17).

Доказательство: Суммируя по j уравнение (23) во внутренних узлах сетки (для уравнения (24) действия аналогичны), можно получить:

$$\sum_{j=1}^{N_z-2} H(t_{l+0.5}, z_{j+0.5}) - \sum_{j=1}^{N_z-2} H(t_{l-0.5}, z_{j+0.5}) = -\frac{\tau}{h} (E(t_l, z_{N_z-1}) - E(t_l, z_1)), \quad (38)$$

Прибавив к этой сумме уравнения, записанные в граничных узлах, приходим к следующему выражению:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{N_z-1} H(t_{l+0.5}, z_{j+0.5}) - \sum_{j=0}^{N_z-1} H(t_{l-0.5}, z_{j+0.5}) = -\frac{\tau}{h} E(t_l, z_{N_z-1}) - E(t_l, z_1) \\ & + 2\frac{\tau}{h} (H(t_{l-0.5}, z_{1.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{0.5})) - (H(t_{l-0.5}, z_{1.5}) - H(t_{l-1.5}, z_{1.5})) - \\ & - 2\frac{\tau}{h} (H(t_{l-0.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{N_z-1.5})) - (H(t_{l-0.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{N_z-1.5})) \end{aligned} \quad (39)$$

Просуммировав это выражение по индексу l от 1 до $N_t - 1$ (учитывая уравнения (36),(37) для $l = 1, 2$) можно получить искомым разностный аналог закона сохранения:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{N_z-1} (H(t_{N_t-0.5}, z_{j+0.5}) - H(t_{1.5}, z_{j+0.5})) = -\frac{\tau}{h} \sum_{l=2}^{N_t-1} (E(t_l, z_{N_z-1}) - E(t_l, z_1)) \\ & + 2\frac{\tau}{h} \sum_{l=2}^{N_t-1} (H(t_{l-0.5}, z_{1.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{0.5})) - (H(t_{N_t-1.5}, z_{1.5}) - H(t_{0.5}, z_{1.5})) - \\ & - 2\frac{\tau}{h} \sum_{l=2}^{N_t-1} (H(t_{l-0.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{N_z-1.5})) - (H(t_{N_t-1.5}, z_{N_z-0.5}) - H(t_{0.5}, z_{N_z-1.5})) \end{aligned} \quad (40)$$

Если электромагнитное поле в граничных узлах сетки равно нулю, то из соотношения (39) следует разностный аналог инварианта (18):

$$\sum_{j=0}^{N_z-1} H(t_{i+0.5}, z_{j+0.5}) = \sum_{j=0}^{N_z-1} H(t_{i-0.5}, z_{j+0.5}) = \sum_{j=0}^{N_z-1} H(t_{0.5}, z_{j+0.5}) = const, \quad (41)$$

Аналогично можно доказать существование разностного аналога второго инварианта из (18).

Лемма доказана.

Система уравнений (23)-(30) является нелинейной относительно значений напряженности электрического поля E и матрицы плотности ρ . Для их решения применяем метод простой итерации:

$$\frac{H(t_{l+0.5}, z_{j+0.5}) - H(t_{l-0.5}, z_{j+0.5})}{\tau} = -\frac{E(t_l, z_{j+1}) - E(t_l, z_j)}{h}, \quad (42)$$

$$\frac{D(t_{l+1}, z_j) - D(t_l, z_j)}{\tau} = -\frac{H(t_{l+0.5}, z_{j+0.5}) - H(t_{l+0.5}, z_{j-0.5})}{h}, \quad (43)$$

$$\frac{\rho_{mn}^{s+1}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{mn}(t_l, z_j)}{\tau} + (\gamma_{mn} + i\omega_{mn})\tilde{\rho}_{mn}^s = i\alpha\tilde{E}^s \cdot \sum_q (d_{mq}\tilde{\rho}_{qn}^s - \tilde{\rho}_{mq}^s d_{qn}), \quad (44)$$

$$\frac{\rho_{mm}^{s+1}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{mm}(t_l, z_j)}{\tau} + \sum_q (W_{mq}\tilde{\rho}_{mm}^s - \tilde{\rho}_{qq}^s W_{qm}) = i\alpha\tilde{E}^s \cdot \sum_q (d_{mq}\tilde{\rho}_{qm}^s - \tilde{\rho}_{mq}^s d_{qm}), \quad (45)$$

$$E^{s+1}(t_{l+1}, z_j) = D(t_{l+1}, z_j) - \sum_q \sum_r d_{qr}\rho_{rq}^s(t_{l+1}, z_j), \quad l = \overline{2, N_t - 1}, j = \overline{2, N_z - 1}, \quad (46)$$

$$\tilde{E}^s = \left(\frac{E^s(t_{l+1}, z_j) + E(t_l, z_j)}{2} \right), \tilde{\rho}_{mn}^s = \frac{(\rho_{mn}^s(t_{l+1}, z_j) + \rho_{mn}(t_l, z_j))}{2}, s = 1, 2, \dots, \quad (47)$$

$$E^0(t_{l+1}, z_j) = E(t_l, z_j), \quad j = \overline{L_{left}/h, L_{right}/h}. \quad (48)$$

Нулевое итерационное приближение бралось с предыдущего слоя по времени.

Итерационный процесс прекращался при выполнении следующих условий:

$$\left| E^{s+1}(t_{l+1}, z_j) - E^s(t_{l+1}, z_j) \right| < \varepsilon_1 \left| E^s(t_{l+1}, z_j) \right| + \varepsilon_2, \quad (49)$$

$$\left| \rho_{mn}^{s+1}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{mn}^s(t_{l+1}, z_j) \right| < \varepsilon_1 \left| \rho_{mn}^s(t_{l+1}, z_j) \right| + \varepsilon_2, \quad (50)$$

где ε_1 и ε_2 – положительные числа, задаваемые априорно и определяющие точность итерационного процесса (в наших расчетах 10^{-8} и 10^{-10} соответственно).

4. Результаты компьютерного моделирования

4.1. Тестирование конечно-разностной схемы

Для тестирования конечно-разностной схемы рассматривались следующие задачи, являющиеся частными случаями системы уравнений (12)-(14) с известными законами эволюции характеристик поля и среды.

1. Двухуровневая среда. Доказательство существования инвариантов уравнений Максвелла-Блоха.

Эволюцию двухуровневой среды, если пренебречь процессами релаксации, в случае действительного дипольного момента d_{12} , можно описать следующими уравнениями:

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} + i\omega_{12}\rho_{12} = i\alpha E d_{12}(\rho_{22} - \rho_{11}), \quad (51)$$

$$\frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} + i\omega_{21}\rho_{21} = -i\alpha E d_{12}(\rho_{22} - \rho_{11}), \quad (52)$$

$$\frac{\partial(\rho_{22} - \rho_{11})}{\partial t} = 2i\alpha E d_{12}(\rho_{12} - \rho_{21}), \quad (53)$$

совместно с уравнениями (12) для электромагнитного поля, данная система называется уравнениями Максвелла-Блоха.

Умножив уравнение (51) на $2\rho_{12}^*$, уравнение (52) – на $2\rho_{21}^*$, и уравнение (53) на $(\rho_{22} - \rho_{11})$, просуммировав их с учетом эрмитовости матрицы плотности, можно соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t} (4 \cdot \rho_{12}^2 + (\rho_{22} - \rho_{11})^2) = 0, \quad (54)$$

из которого следует инвариант:

$$4 \cdot \rho_{12}^2 + (\rho_{22} - \rho_{11})^2 = const. \quad (55)$$

Разностные уравнения (25)-(26) для данного случая принимают вид:

$$\frac{\rho_{12}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{12}(t_l, z_j)}{\tau} + i\omega_{12}\tilde{\rho}_{12} = i\alpha\tilde{E} \cdot d_{12}(\tilde{\rho}_{11} - \tilde{\rho}_{22}), \quad (56)$$

$$\frac{\rho_{21}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{21}(t_l, z_j)}{\tau} + i\omega_{21}\tilde{\rho}_{21} = i\alpha\tilde{E} \cdot d_{12}(\tilde{\rho}_{22} - \tilde{\rho}_{11}), \quad (57)$$

$$\frac{\rho_{11}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{11}(t_l, z_j)}{\tau} = i\alpha\tilde{E} \cdot d_{12}(\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12}), \quad (58)$$

$$\frac{\rho_{22}(t_{l+1}, z_j) - \rho_{22}(t_l, z_j)}{\tau} = i\alpha\tilde{E} \cdot d_{12}(\tilde{\rho}_{12} - \tilde{\rho}_{21}), \quad (59)$$

$$\tilde{\rho}_{mn} = \frac{(\rho_{mn}(t_{l+1}, z_j) + \rho_{mn}(t_l, z_j))}{2}, \quad j = \overline{L_{left}/h, L_{right}/h}, \quad l = \overline{2, N_t - 1}. \quad (60)$$

Данные уравнения решаются совместно с уравнениями (23)-(24), описывающими эволюцию электромагнитного поля.

Лемма 2. Для уравнений (56)-(60) существует разностный аналог инварианта (55).

Доказательство: Учитывая эрмитовость матрицы плотности ($\rho_{12} = \rho_{21}^*$), умножив уравнение (56) на $2\tilde{\rho}_{12}^*$, уравнение (57) – на $2\tilde{\rho}_{21}^*$, уравнение (58) – на $-(\tilde{\rho}_{22} - \tilde{\rho}_{11})$, а уравнение (59) – на $(\tilde{\rho}_{22} - \tilde{\rho}_{11})$, и, просуммировав эти четыре уравнения, в результате получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} & (\rho_{22}(t_l, z_j) - \rho_{11}(t_l, z_j))^2 + 4|\rho_{12}(t_l, z_j)|^2 = \\ & (\rho_{22}(t_1, z_j) - \rho_{11}(t_1, z_j))^2 + 4|\rho_{12}(t_1, z_j)|^2 = const. \end{aligned} \quad (61)$$

Лемма доказана.

В компьютерных экспериментах выбиралась двухуровневая среда с частотой перехода $\omega_{21} = 10$. Начальный импульс формы (8) имел несущую частоту $\omega_p = 5$, характерную длительность $\tau_p = 5$, и амплитуду $E_0 = 1$. До воздействия импульса среда находилась в основном состоянии (9)-(10). Протяженность среды составляла 7 безразмерных единиц, шаги сетки h и τ были равны 0.01. Влияние релаксации в среде не учитывалось $\gamma_{mn} = 0$, $W_{mn} = 0$. Если $d_{11} = d_{22} = 0$, $d_{21} = d_{12} = d$, поляризация среды равна:

$$P = 2d \operatorname{Re}(\rho_{21}). \quad (62)$$

Дипольный момент среды d был равен 0.01. Константа взаимодействия $\alpha = 67.54$.

На Рис.3а изображена эволюция населенности второго энергетического уровня среды (ρ_{22}) и недиагонального матричного элемента (ρ_{21}) во время прохождения импульса. Хотя импульс не является резонансным населенность второго уровня не остается равной нулю. Электрическое

Следующий тест был посвящен исследованию эволюции населенностей второго энергетического уровня при нерезонансном ($\omega_p = 5$) и резонансном ($\omega_p = 10$) взаимодействии электромагнитного поля с инверсно заселенной средой ($\rho_{22} = 1, \rho_{21} = 0, \rho_{11} = 0$ при $t = 0$). Амплитуда и длительность импульсов составляли $E_0 = 1$ и $\tau_p = 5$, соответственно. Параметры среды были те же, что и в предыдущем параграфе: $\gamma_{mn} = 0, W_{mn} = 0, d_{11} = d_{22} = 0$, константа взаимодействия $\alpha = 67.54$. Эволюция заселенности второго уровня расчетов представлены на Рис.4а. На Рис. 4б изображены начальные спектры рассмотренных импульсов, определяемые по следующей формуле:

$$E(\omega_n) = \sum_{k=1}^{N_z} E(z_k, t_1) \exp(-\frac{2\pi i}{N_z} kn) |, \quad n = \overline{1, N_z}, \quad (63)$$

где $\omega_n = 2\pi n / N_z$.

Из Рис. 4а видно, что в случае резонансного взаимодействия населенность второго уровня быстро уменьшается, и со временем система переходит в основное состояние, что сопровождается непрерывной генерацией излучения на частоте перехода. В случае нерезонансного взаимодействия, в момент $t \sim 20$, когда импульс проходит через рассматриваемое сечение среды, можно наблюдать колебания населенности второго уровня в соответствии с требованиями инварианта (56), после чего среда возвращается в исходное состояние. Импульс так же не меняет своей формы в процессе прохождения. Однако, по прошествии достаточно большого времени ($t \sim 60$), и в этом случае происходит лавинообразное уменьшение населенности второго уровня.

Система с полностью инвертированной населенностью является неустойчивой, и погрешностей вычисления достаточно, чтобы стимулировать переходы на резонансной частоте, которых быть не должно. Таким образом, и резонансный, и нерезонансный импульсы вызывают переходы между уровнями. Однако, в случае нерезонансного импульса момент лавинообразного изменения населенности (и возрастания поля) происходит значительно позже, после того, как импульс прошел через рассматриваемое сечение среды ($t \sim 20$) и покинул среду ($t \sim 30$), и зависит от величины шага по t .

2. Закон отражения Френеля.

На двухуровневую полубесконечную среду с частотой перехода $\omega_{21} = 6$ падает гауссов импульс длительностью $\tau_p \approx 8.9$ ($\tau_p = 80$). Частота импульса варьировалась в пределах значений, заданных в таблице 2. Как известно, в случае воздействия на рассматриваемую среду длинного импульса с нерезонансной частотой стационарное решение уравнения (52)-(54) дает следующее выражение для диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon = 2\alpha d_{12}^2 \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 + \gamma_{21}^2} (\rho_{11} - \rho_{22}), \quad (64)$$

где $(\rho_{11} - \rho_{22})$ – равновесная разность населенностей.

Коэффициент отражения электромагнитного поля определяется по формуле Френеля:

$$R_{theory} = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon} - 1}{\sqrt{\varepsilon} + 1} \right)^2. \quad (65)$$

При компьютерном моделировании коэффициент отражения рассчитывался как отношение энергии, отраженной от среды, к энергии начального импульса:

$$R = \left(\sum_{j=1}^{j_s-1} (E(z_j, N_t))^2 + \sum_{l=1}^{N_t} (E(z_1, t_l))^2 \right) / \sum_{j=0}^{j_s-1} (E(z_j, t_1))^2, \quad (66)$$

здесь $j_s = L_{left}/h$ соответствует координате левой границы среды.

В таблице 2 приведены коэффициенты отражения, рассчитанные по формулам (65) и (66) для различных параметров среды и частот импульса. Видно, что отклонение коэффициента отражения, рассчитанного по формуле (66) от полученных по формуле Френеля, не превышает десятых долей процента для частот достаточно удаленных от резонанса.

Таблица 2. Сравнение коэффициентов отражения, рассчитанных по формуле Френеля и полученных из результатов компьютерного моделирования.

Частота импульса ω	Значение дипольного момента d_{12}	Значение коэффициента релаксации γ_{12}	Вычисленное значение коэффициента отражения R	Аналитическое значение коэффициента отражения $R_{теор}$
0.5	0.1	0	0.0508	0.0505
0.5	0.3	0	0.2694	0.2693
0.5	0.1	1	0.0493	0.0493
0.5	0.3	1	0.2610	0.2650
0.5	0.1	10	0.0142	0.0144
0.5	0.3	10	0.0976	0.1066
1	0.1	0	0.0517	0.0505
1	0.3	0	0.2726	0.2693
2	0.1	0	0.0517	0.0505
2	0.3	0	0.2726	0.2693
3	0.1	0	0.0517	0.0505
3	0.3	0	0.2726	0.2693
4	0.1	0	0.0517	0.0505

4.2. Взаимодействие электромагнитного импульса с многоуровневой средой. Каскадный механизм возбуждения энергетических уровней.

При взаимодействии со средой, имеющей несколько уровней, спектр импульса может уширяться, в нем могут появляться новые частоты. Это явление может быть обусловлено каскадным механизмом возбуждения уровней среды [26]. Чтобы продемонстрировать этот механизм, было проведено компьютерное моделирование взаимодействия различных импульсов изображенных на рис. 5 со средой, обладающей пятью энергетическими уровнями и следующими параметрами: $\alpha = 67.54$, $d_{mn} = 0.02$, $\gamma_{mn} = 0.5$, $W_{mn} = 10^{-7}$, и имеющей протяженность $L_s = (L_{right} - L_{left}) = 7$. Значения частот соответствующих переходов приведены в табл. 3.

Следует отметить, что согласно значениям Табл. 2 пиковая интенсивность импульса равна $1.21 \cdot 10^{12}$ Вт/см². Однако, те же высокочастотные пики в спектре, обусловленные каскадным механизмом, можно обнаружить и при существенно меньших значениях интенсивности падающего импульса ($\sim 10^6$ Вт/см²), хотя при этом высота пиков становится значительно меньше.

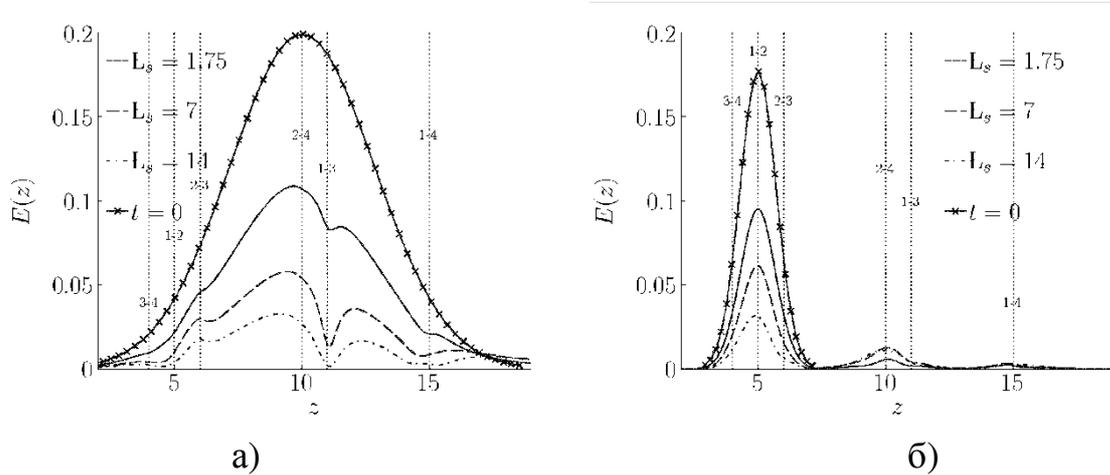


Рис.7. Спектры короткого импульса ($\omega_p = 10$, $E_0 = 2$, $\tau_p = 0.5$) (а) и длинного импульса ($\omega_p = 5$, $E_0 = 1$, $\tau_p = 2$) (б) после прохождения через среды различной длины $L_s = L_{right} - L_{left}$.

4.3. Зависимость спектра прошедшего импульса от конечной длины среды.

Очевидно, что длина среды влияет на спектры импульсов. Для иллюстрации этого проводилось компьютерное моделирование трех различных ситуаций, соответствующие трем соотношениям пространственной протяженностью импульса и длины среды. Результаты представлены на Рис. 7. Для выбранных параметров интенсивность отраженной волны была на несколько порядков слабее интенсивности прошедшего импульса и поэтому спектры отраженных импульсов не представлены.

Основное влияние на спектр при варьировании длины заключается в изменении амплитуд пиков и провалов в спектре импульса, что очевидно соответствует увеличению времени взаимодействия со средой. Кроме того, положения пиков незначительно смещаются с ростом длины.

4.4. Влияние начальной фазы импульса на обогащение спектра.

На слой среды падали короткие импульсы длительностью $\tau_p = 0.316$ с несущей частотой $\omega_p = 5$, амплитудой $E_0 = 1$ и различной начальной фазой ($\varphi = -\pi/4, 0, \pi/4, \pi/2$) задававшиеся следующим выражением:

$$E(z) = H(z) = E_0 \cdot \exp(-(z - z_p)^2 / \tau_p^2) \cdot \cos(\omega_p \cdot (z - z_p) + \varphi). \quad (68)$$

Среда имела пять энергетических уровней, дипольные моменты перехода $d_{ij} = 0.1$ и протяженность $L = 10$. Частоты переходов между энергетическими уровнями, приведены в Таблице 4. Константа взаимодействия α составляла 67.54. На Рис. 8 показана начальная форма импульса, соответствующая различной абсолютной фазе, а на Рис. 9 изображен его спектр и спектр прошедшего через среду импульса. На Рис. 10 изображено поведение населенностей энергетических уровней среды.

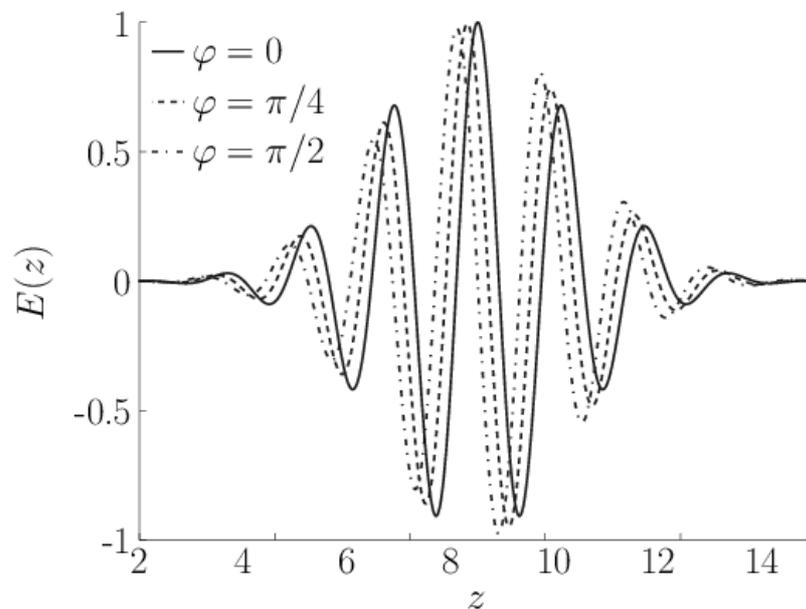


Рис.8. Форма начального импульса в зависимости от его абсолютной фазы φ .

Таблица 4. Значения частот ω_{ij} переходов между энергетическими уровнями среды.

i \ j	1	2	3	4	5
1	0	-3,5	-6	-8	-10,2
2	3,5	0	-2,5	-4,5	-6,7
3	6	2,5	0	-2	-4,2
4	8	4,5	2	0	-2,2
5	10,2	6,7	4,2	2,2	0

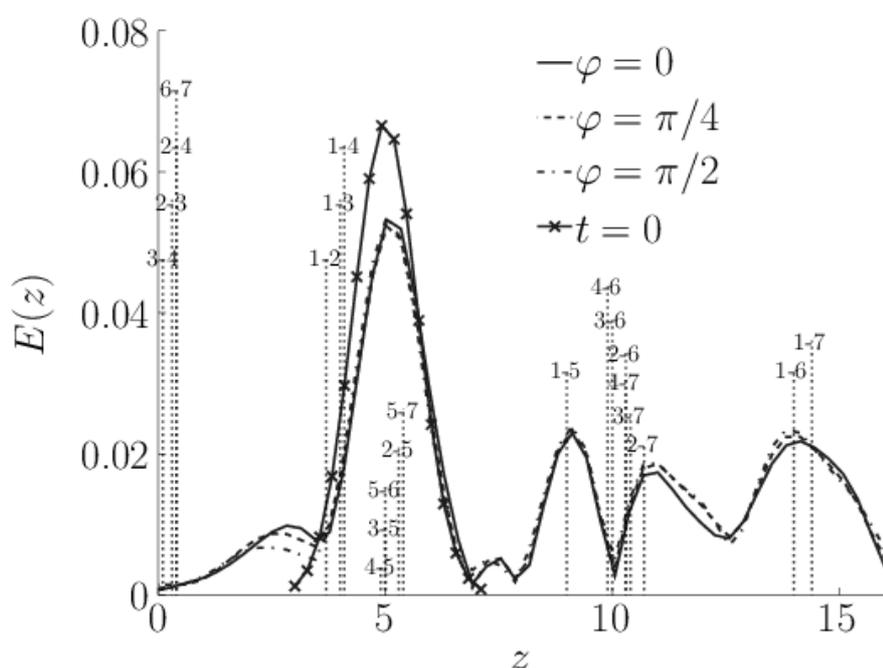


Рис. 9. Спектры прошедших импульсов для начальной фазы $\varphi = 0$ (черная линия), $\pi/4$ (пунктирная линия), $\pi/2$ (штрих-пунктирная линия). Серая сплошная линия изображает спектр падающего импульса. Вертикальные точечные линии обозначают частоты переходов в веществе.

Очевидно, что спектр падающего импульса не зависит от абсолютной фазы. Однако, в процессе взаимодействия импульса со средой, из-за нестационарного отклика, она будет влиять на спектр прошедшего и отраженного импульсов. Например, в зависимости от фазы импульса на Рис. 9 изменяются соотношения интенсивностей близких пиков и, соответственно форма спектральной кривой. Так, изменения имеют место для переходов 1-6 и 1-7, или 3-4, 3-4. На графиках эволюции населенности энер-

гетических уровней также можно видеть, что в зависимости от абсолютной фазы изменяется скорость переходов на определенные уровни.

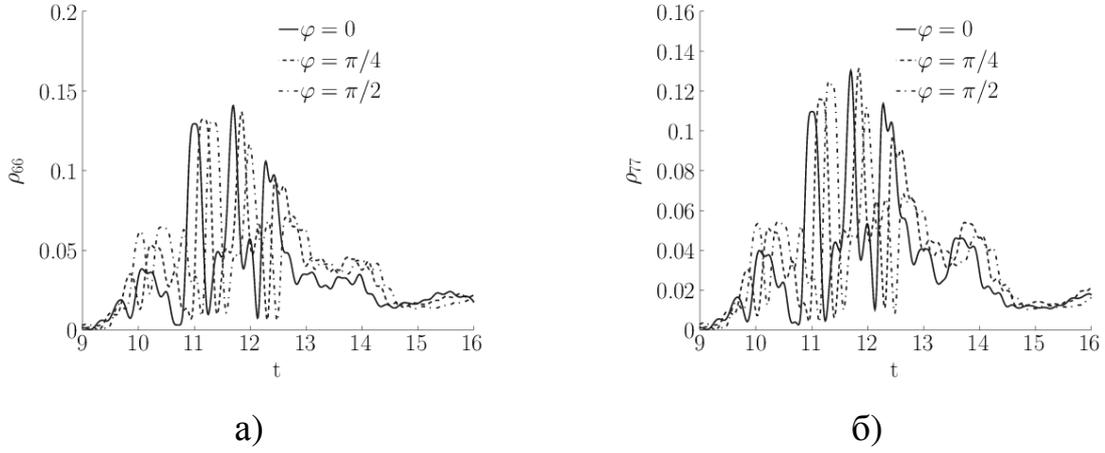


Рис.10. Эволюция населенностей шестого (а) и седьмого (б) энергетических уровней среды для импульсов с различной начальной фазой $\varphi = 0$ (черная линия), $\pi/4$ (пунктирная линия), $\pi/2$ (штрих-пунктирная линия).

Помимо максимумов спектра, однозначно соответствующих частотам переходов в среде, на Рис. 9 наблюдаются и другие максимумы, например, на частотах 3 и 7.5. Их появление можно объяснить тем, что в анализируемом случае взаимодействие импульса со средой становится нелинейным, и возможно появление высших гармоник. Для объяснения их появления, рассмотрим систему уравнений для двухуровневой среды (51-53), используя инвариант (55) и свойства эрмитовости матрицы плотности, из этой системы можно получить одно уравнение относительно ρ_{12} :

$$\frac{\partial^2 \rho_{12}}{\partial t^2} + i\omega_{12} \frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} - i\alpha d_{12} \frac{\partial E}{\partial t} \sqrt{I_0 - 4\rho_{12}^2} - 2(i\alpha d_{12})^2 E^2 (\rho_{12} - \rho_{12}^*) = 0, \quad (69)$$

где через I_0 обозначено значение инварианта (56). Далее, можно рассмотреть слабо изменяющееся поле E , тогда представив его в виде $E = A \cdot \exp(i\Omega t)$, решение уравнения (69) можно искать в виде разложения по степеням (αd_{12}) :

$$\rho_{12} = \rho_{12}^{(0)} + (\alpha d)^1 \rho_{12}^{(1)} + (\alpha d)^2 \rho_{12}^{(2)}, \quad (70)$$

$$\frac{\partial^2 \rho_{12}^{(0)}}{\partial t^2} + i\omega_{12} \frac{\partial \rho_{12}^{(0)}}{\partial t} = 0, \quad (71)$$

$$\frac{\partial^2 \rho_{12}^{(1)}}{\partial t^2} - i(\alpha d_{12})(i\Omega)E\sqrt{I_0 - 4(\rho_{12}^{(0)})^2} = 0, \quad (72)$$

$$\frac{\partial^2 \rho_{12}^{(2)}}{\partial t^2} - 2(\alpha d_{12})^2 \Omega^2 E^2 \left(\rho_{12}^{(1)} - (\rho_{12}^{(1)})^* \right) = 0. \quad (73)$$

Уравнение (72) описывает собственные колебания ρ_{12} . Если рассмотреть только вынужденные колебания ($\rho_{12}^0 = 0$), то решение уравнения (72) имеет вид:

$$\rho_{12}^{(1)} = \sqrt{I_0} (\alpha d_{12}) A \cdot \exp(i\Omega t) / \Omega = b A e^{i\Omega t}. \quad (74)$$

Подставив (74) в (73) можно получить уравнение

$$\frac{\partial^2 \rho_{12}^{(2)}}{\partial t^2} = 2(\alpha d_{12})^2 \Omega^2 A^2 e^{i2\Omega t} (b A^* e^{-i\Omega t} - b A e^{i\Omega t}) = b_1 A^2 A^* e^{i\Omega t} + b_2 A^3 e^{i3\Omega t}, \quad (75)$$

где явно присутствует третья гармоника внешнего поля. А поскольку в случае двухуровневой системы поляризация определяется как

$$P = d_{12}(\rho_{12}^* - \rho_{12}), \quad (76)$$

то и в спектре электромагнитного поля тоже появится соответствующая частота.

В случае взаимодействия электромагнитного импульса с многоуровневой средой, возможно и появление комбинационных частот.

5. Заключение

В работе предложена нелинейная консервативная конечно-разностная схема для уравнений описывающих нестационарный нелинейный отклик вещества в полуклассическом приближении. Доказано, что она консервативна, проведено ее тестирование для известных решений системы уравнений.

В результате проведенного компьютерного моделирования был продемонстрирован каскадный механизм возбуждения высоких энергетических уровней молекул через промежуточные энергетические уровни, если энергия кванта излучения меньше разности энергий рассматриваемого энергетического перехода. Посредством этого механизма обогащается спектр импульса, прошедшего среду, по сравнению со спектром падающего импульса.

Показано существенное влияние абсолютной фазы падающего импульса на его взаимодействия со средой, в частности, на относительные скорости межуровневых переходов. Продемонстрировано и объяснено появление третьей гармоники в спектре прошедшего импульса, и возможность появления комбинационных частот за счет нелинейности взаимодействия.

Литература:

1. *Astapenko V. A.* Interaction of ultrashort electromagnetic pulses with matter. // Springer Science & Business Media. 2013. 94 p.
2. *Komarova E. S., Trofimov V. A., Fedotov M. V.* Transmission of a few-Cycle Femtosecond Pulse Through an Optically Thin Plate. // Computational Mathematics and Modeling 2015. Т. 26. С. 467-483.
3. *Zhang C., Jin B., Han J., Kawayama I., Murakami H. et al.* Terahertz nonlinear superconducting metamaterials. // Appl. Phys. Lett., 2013. V. 102. P. 081121
4. *Al-Naib I., Poschmann M., and Dignam M. M.* Optimizing third-harmonic generation at terahertz frequencies in grapheme. // Phys. Rev. B 2015. V. 91. P. 205407
5. *Kim K. Y., Taylor A. J., Glowina J. H., Rodriguez G.* Coherent control of terahertz supercontinuum generation in ultrafast laser–gas interactions. // Nature Photonics 2008. V. 2.
6. *Paulus G. G., Grasbon F., Walther H., Villoresi P., Nisoli M., Stagira S., Priori E., De Silvestri S.* Absolute-phase phenomena in photoionization with few-cycle laser pulses. // Nature. 2001. V. 414. P. 182-184.
7. *Скрипов Д.К., Трофимов В.А.* Зависимость спектра фемтосекундного импульса от его абсолютной фазы при распространении в нелинейной среде. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 27. С. 6-15.
8. *Wu C., Zeng G., Gao Y., Xu N., Peng L.-Y., Jiang H., and Gong Q.* Controlling molecular rotational population by wave-packet interference.// The Journal of Chemical Physics. 2009. V.130. P. 231102.
9. *Скрипов Д.К., Трофимов В.А.* Гистерезисная зависимость некоторых спектральных компонент фемтосекундного импульса при его распространении в нелинейной среде. // ЖТФ. 2004. Т. 74. С. 77-82.
10. *Yin X., Ng B., and Abbott D.,* Terahertz Imaging for Biomedical Applications: Pattern Recognition and Tomographic Reconstruction. // Springer. 2012.

11. *Dombi P., Apolonski A., Lemell Ch., Paulus G.G. et al.* Direct measurement and analysis of the carrier-envelope phase in light pulses approaching the single-cycle regime. // *New Journal of Physics*. 2004. V. 6. Paper number 39.
12. *Zhong F., Jiang H., Gong Q.* Tuning the frequency of few-cycle femtosecond laser pulses by molecular phase modulation. // *Optics Express*. 2009. V. 17. P. 1472-1477.
13. *Скрипов Д.К., Трофимов В.А.* О применимости модели Дуффинга для описания распространения фемтосекундных световых импульсов в нелинейных средах. // *Труды УНЦ волоконно-оптических материалов и устройств*. Москва: Издательство учебно-научного центра «Волоконно-оптические технологии, материалы и устройства». 2000. С. 82-92.
14. *Скрипов Д.К., Трофимов В.А.* Формирование высокочастотного субимпульса при распространении фемтосекундного импульса в среде с насыщающимся потенциалом. // *Оптика и спектроскопия*. 2003. Т. 95. С. 347-359.
15. *Fleischer S., Zhou Y., Field R. W., and Nelson K. A.* Molecular orientation and alignment by intense single-cycle thz pulses. // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V.107. P. 163603.
16. *Zhou Q. L., Shi Y., Jin B., Zhang C.* Ultrafast carrier dynamics and terahertz conductivity of photoexcited GaAs under electric field. // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V.93. P.102103.
17. *Kampfrath T., Sell A., Klatt G., Pashkin A., Mahrlein S., Dekorsy T., Wolf M., Fiebig M., Leitenstorfer A., and Huber R.* Coherent terahertz control of antiferromagnetic spin waves. // *Nat Photon.* 2011. V.5. P.31.
18. *Grischkowsky D. and Armstrong J. A.* Self-defocusing of light by adiabatic following in rubidium vapor. // *Phys. Rev. A.* 1972. V.6. P. 1566.
19. *Harris S. E.* Electromagnetically induced transparency. // *Physics Today*. 1997. V.50. P.36.
20. *Fleischhauer M. and Lukin M. D.* Dark-state polaritons in electromagnetically induced transparency. // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V.84. P. 5094.
21. *Hau L. V., Harris S. E., Dutton Z., and Behroozi C. H.* Light speed reduction to 17 metres per second in an ultracold atomic. // *Nature*. 1999. V.397. P.594.
22. *Chu S. and Wong S.* Linear pulse propagation in an absorbing medium. // *Phys. Rev. Lett.* 1982. V.48. P. 738.
23. *Yee Kane.* Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14. 1966. P. 302–307.

24. *Клышко Д.Н.* Физические основы квантовой электроники. //М. Наука. 1986. 296 стр.
25. *Головизнин В.М., Самарский А.А.* Некоторые свойства разностной схемы «кабаре». // Математическое моделирование. 1998. Т.10. N1. С.101-116.
26. *Trofimov V., Zagursky D., Zakharova I.* High Energy Level Excitation of Molecules due to Cascade Mechanism of Broadband THz Pulse Energy Absorption. // Frontiers in Optics 2015, OSA Technical Digest (online). 2015. P. JTu4A.9.