

二能级体系 Maxwell-Bloch 方程的数值求解及其应用^{*}

蒋 月, 余向阳

(中山大学光电材料与技术国家重点实验室, 广东 广州 510275)

摘 要: 用有限差分法求解了二能级体系的 Maxwell-Bloch (MB) 耦合方程。在忽略弛豫时间和共振的条件下, MB 方程可化为标准的 sine-Gordon (SG) 方程, MB 方程数值的解的结果与 SG 方程孤子解的结果有很好的 consistency。所建立的数值解法, 具有良好的收敛性和可靠性, 并可保持算法的误差阶数, 因而算法是可靠实用的。求解结果用于分析二能级体系与超短激光脉冲相互作用的光传输特性。同时, 验证了面积定理, 研究了初始面积、失谐量和弛豫时间对光场面积演化的影响。该方法对求解 MB 方程以及修正的这类微分方程组具有普适性。

关键词: Maxwell-Bloch 方程; 二能级体系; 偏微分方程数值解法; 面积定理

中图分类号: O241.82 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2007) S2-0176-04

激光超短脉冲与物质的近共振相互作用一直是激光物理学和量子光学感兴趣的研究课题。光与物质相互作用, 一方面通过光对体系施加的影响而改变着体系的性质, 另一方面, 体系也反过来影响着光场的性质。在光与物质相互作用半经典理论框架下, 可用光学 Bloch 方程很好地描述激光超短脉冲与二能级体系近共振相互作用下体系的性质^[1], 光学 Bloch 的解析求解和数值解法已得到了很好的研究^[2-3]。如果我们要研究光场在共振介质中的传播特性, 则需要把 Bloch 方程和 Maxwell 方程进行耦合, 从而得到所谓的 Maxwell-Bloch (MB) 方程^[1]。MB 方程是研究激光物理中的相干瞬态过程、光脉冲传播和光学孤子等重要量子光学现象的基础。MB 方程是一组含时的偏微分方程组, 在共振、忽略弛豫时间的条件下, 可以化为标准的 sine-Gordon (SG) 方程的形式, 这是一类重要的非线性发展方程, 其解析求解方法及其物理应用都得到广泛而深入的研究^[4]。但在有失谐、考虑弛豫时间时, MB 方程已无法求得其解析解, 这时需要应用偏微分方程的数值方法来求解。本文作为光与物质相互作用半经典理论研究系列论文的第三篇, 在前二篇即光学 Bloch 方程求解的工作基础上^[2-3], 建立了 MB 方程的数值解法, 为了验证算法的可靠性, 与 SG 方程的孤子解析解的结果做了比较, 也与有关文献的结果进行了比较。计算结果表明, 在合适步长下对 MB 方程所建立的有限差分法是收敛并可用的, 能保持算法所具有的相应的误

差阶数。所建立的数值算法, 对这类偏微分方程具有普适性, 可用于研究相关问题的物理机制与特性, 作为一个应用示例, 我们研究了光面积的演化规律。

1 二能级体系的 MB 和 SG 方程

光脉冲与均匀展宽的二能级体系近共振的相互作用, 在电偶极近似、慢变近似和旋转波近似下, 可以用如下的 MB 方程来描述体系与极化光场的运动^[1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_2 \cdot \psi(z, t) - \Delta \cdot \psi(z, t) \\ \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_2 \cdot \psi(z, t) + \Delta \cdot \psi(z, t) + \\ &\quad \frac{\mu_{21} E_0(z, t)}{\hbar} \cdot w(z, t) \\ \frac{\partial w(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_1 [w(z, t) + 1] - \frac{\mu_{21} E_0(z, t)}{\hbar} \cdot \psi(z, t) \\ \frac{\partial E_0(z, t)}{\partial z} + \frac{n}{c} \frac{\partial E_0(z, t)}{\partial t} &= \frac{\mu_0 \epsilon_0 N \mu_{21}}{2n} \cdot \psi(z, t) \end{aligned} \quad (1)$$

式中: $\psi = \rho_{21} + \rho_{12}$, $\psi = \dot{\rho}_{21} - \dot{\rho}_{12}$, $w = \rho_{22} - \rho_{11}$, 称为 Bloch 矢量; ρ_{21} 和 ρ_{12} 为分别是偶极矩的正频部分 $\rho_{21} = \rho_{21} e^{-i\omega_0 t + ikz}$ 与负频部分 $\rho_{12} = \rho_{12} e^{i\omega_0 t - ikz}$ 的慢变振幅, 而 ρ_{21} , ρ_{12} 为密度矩阵的对角元; $\rho_{21} = \rho_{12}^*$, ρ_{22} , ρ_{11} 为上、下能级的粒子布居; ω 为入射光的载波频率, $\Delta = \omega_{21} - \omega$ 为共振失谐量, $\omega_{21} = (\epsilon_2$

* 收稿日期: 2007-01-31

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10574166)

作者简介: 蒋月 (1983 年生) 女, 研究生; 通讯联系人: 余向阳; E-mail: cesyx@mail.sysu.edu.cn

$-\epsilon_1)/\hbar$ 为共振频率, ϵ_2, ϵ_1 分别为上、下能级的本征能, $\hbar$ 为 Planck 常数; $\Gamma_1=1/T_1$, T_1 为纵向弛豫时间 (粒子的衰减时间), $\Gamma_2=1/T_2$, T_2 是横向弛豫时间 (退相时间)。 $E_0(z, t)$ 为光场的振幅, μ_{21} 为电偶极矩。 c 为真空中的光速, μ_0 为真空中的电磁系数。 N 为单位体积中的粒子数, n 为介质的线性折射率。

定义拉比频率 $\Omega = \frac{\mu_{21}}{\hbar} E_0$ 和有效时间 $\tau_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{N\mu_0\omega}} \frac{n}{\epsilon_{21}}$ 。并令: $t = \tau_0 \tau$, $z = n z_0/\epsilon_0$, $\Omega' = \tau_0 \Omega$, $\Gamma'_2 = \Gamma_2/\tau_0$, $\Gamma'_1 = \Gamma_1/\tau_0$, $\Delta' = \tau_0 \Delta$ 为简洁起见, 变换后, 将 $\psi, \Omega', \Gamma'_2, \Gamma'_1, \Delta'$ 依然写成 $\psi, \Omega, \Gamma_2, \Gamma_1, \Delta$ 这样可得到无量纲的 MB 方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_2 \cdot u(z, t) - \Delta \cdot v(z, t) \\ \frac{\partial v(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_2 \cdot v(z, t) + \Delta \cdot u(z, t) + \Omega(z, t) \cdot w(z, t) \\ \frac{\partial w(z, t)}{\partial t} &= -\Gamma_1 [w(z, t) + 1] - \Omega(z, t) \cdot v(z, t) \\ \frac{\partial \Omega(z, t)}{\partial z} + \frac{\partial \Omega(z, t)}{\partial t} &= v(z, t) \end{aligned} \tag{2}$$

定义 Bloch 角:

$$\theta(z, t) = \int_0^t \Omega(z, \tau) d\tau \tag{3}$$

上式对时间的全积分, 就是所谓的光脉冲面积, 即 $S = \int_0^t \Omega(z, \tau) d\tau$ 而其对时间导数即为拉比频率:

$$\Omega(z, t) = \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \tag{4}$$

在共振、忽略弛豫时间, 初始条件为 $u(t=-\infty) = v(t=-\infty) = 0$, $w(t=-\infty) = -1$ 时, 可得到 (2) 中 Bloch 方程的解^[2]: $u(t) = 0$, $v(t) = -\sin \theta$, $w(t) = -\cos \theta$ 。这样, 经过适当的坐标变换, 可以如下标准的 SG 方程^[4]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} - \frac{\partial \theta}{\partial t} = \sin \theta \tag{5}$$

式中: $z = \frac{5}{2} z_0 - \frac{1}{2} t$, $t = \frac{3}{2} z + \frac{1}{2} t$

2 MB方程的数值解法和 SG方程的解析解

偏微分方程 (2) 是一阶非线性双曲方程组, 可采用有限差分的方法进行数值求解^[5]。其有限差分格式为:

$$\Omega_{k+1/2} = (\Omega_{k+1} + \Omega_k + \gamma_{k+1} h)/2$$

$$\begin{aligned} u_{k+1/2} &= u_{k+1} - (\Gamma_2 u_{k+1} + \Delta v_{k+1}) h \\ v_{k+1/2} &= v_{k+1} - (\Gamma_2 v_{k+1} - \Delta u_{k+1} - \Omega_{k+1} w_{k+1}) h \\ w_{k+1/2} &= w_{k+1} - [\Gamma_1 (w_{k+1} + 1) + \Omega_{k+1} v_{k+1}] h \end{aligned} \tag{6}$$

式中, $z_{k+1} = z_k + h$, $t_{k+1} = t_k + h$, $s, k = 0, 1, \dots, N-1$, $h = T/N$ 为步长。

在光脉冲边界入射的物理条件下, MB 和 SG 方程的初边界条件为:

$$\Omega(t = \pm \infty, z) = 0, \Omega(z = 0, t) = \Omega_0(t) \tag{7}$$

对方程 (5) 作如下行波变化: $\zeta = z - ct$ 为传播速度。通过解析技术可以得到 SG 方程的单孤立子解为^[4]:

$$\theta(z, t) = 4 \arctan \left[e^{\frac{(1+\epsilon)\zeta(3\epsilon-5)}{2\sqrt{1-\epsilon}}} \right] \tag{8}$$

其对时间的一阶导数为:

$$\Omega(z, t) = \frac{1+\epsilon}{\sqrt{1-\epsilon}} \operatorname{sech} \left\{ \frac{(1+\epsilon)\zeta + (3\epsilon-5)t}{2\sqrt{1-\epsilon}} \right\} \tag{9}$$

应用 (7) 式初边值条件, 可得:

$$\Omega_0(t) = \frac{\sqrt{1+\epsilon}}{\sqrt{1-\epsilon}} \operatorname{sech} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}} t \right\} \tag{10}$$

脉宽为 t 的 2π 双曲正割脉冲, 其形式如下:

$$E_0(t) = \frac{4 \ln(1+\sqrt{2})}{\tau_p} \operatorname{sech} \left\{ \frac{2 \ln(1+\sqrt{2})}{\tau_p} t \right\} \tag{11}$$

比较上面两式, 可得光孤子在二能级体系中的传播速度为:

$$c = \frac{[2 \ln(1+\sqrt{2})/\tau_p]^2 - 1}{[2 \ln(1+\sqrt{2})/\tau_p]^2 + 1} \tag{12}$$

3 数值结果与应用

由 (6) 式的有限差分格式, 编写计算机程序。为了验证算法的收敛性和可靠性, 在与得到解析解相同条件下进行数值计算。入射初始脉冲为如 (11) 式的双曲正割型, 计算时取脉宽 $\tau_p = 10 \text{ fs}$ 。由 (12) 可得光场的归一化面积为 2π 时, $\epsilon = 0.9843$ 。计算时, 归一化的步长取 0.001, 脉冲中心在 100 处, 时间取 0~400 fs, 传播空间距离为 20 μm 。

图 1 (a) 和 (b) 是相同条件下, 有限差分法和解析解 (9) 的结果, 可以看到, 数值计算的结果与解析解的结果是一致的。图 1 (c) 是以解析解为准确解的有限分法的误差, 从图中我们可以看出, 虽然合适步长下, 有限差分法都可以保证计算的收敛性和结果的可靠性, 但误差随长度的增长而变大, 所以在实际计算时, 要注意积分长度与步长的选取。

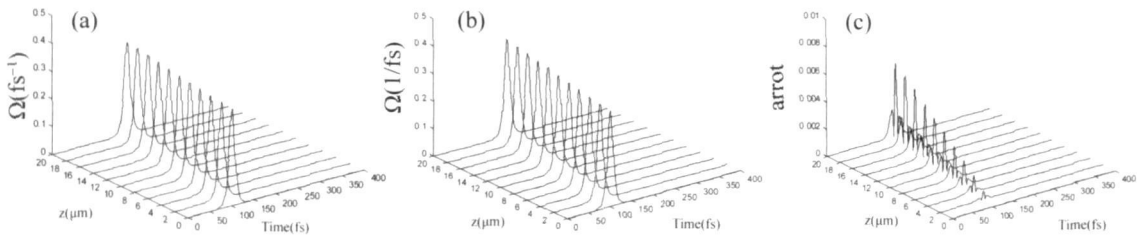


图 1 MB 方程的数值解 (a)、解析解 (b) 和误差 (c)
Fig 1 The numerical result (a), analytical result (b) and the error (c) of MB equations

图 2 是根据文献 [6] 提供的一组接近实验条件的参数, 用我们所建立的数值计算方法和程序计算了光场和粒子布居的演化。计算参数如下: 吸收介质初始条件为 $\psi = \psi_0 = 0$, $\psi_0 = -1$, 脉冲形状为 $\Omega(z, t=0) = \Omega \operatorname{sech}[1.76(t-t_0)/\tau_p]$, Ω 为拉比频率的峰值, τ_p 为脉宽。 $\tau_p = 5 \text{ fs}$, $\omega_0 = \omega_p = 2.3 \text{ fs}^{-1}$ ($\lambda = 820 \text{ nm}$), $t_0 = 50 \text{ fs}$, $\mu_{21} = 2 \times 10^{-29} \text{ A}\cdot\text{m}$, $N = 2 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, $T_1 = 1 \text{ ns}$, $T_2 = 0.5 \text{ ns}$ 相应的脉冲面积 $A = \Omega \tau_p \pi / 1.76$, $\Omega = 1 \text{ fs}^{-1}$ 对应与场

强 $E_0 = 5 \times 10^9 \text{ V/m}$ 即强度 $I = 6.6 \times 10^{12} \text{ W/m}^2$ 的电场。由图可见, 计算结果与文献 [6] 结果是一致的。

光在介质中的传播规律是一个重要的光物理问题, Beer 定律描述了光的指数衰减的规律。而面积定理是 Beer 定律的推广, 很好的描述了光脉冲在共振介质中的传播规律^[7]。面积定理是在一定近似条件下得到的, 虽然很直观地说明了光脉冲的在共振介质中传播规律, 但只能得到光面积大致变化趋势, 而不能得到其变化细节。更准确和详细的规律需要求解 MB 方程才能得到。实际上, 光脉冲面积的传播规律与初始脉冲的面积、弛豫时间和失谐量都有关系的。图 3 显示了不同初始光面积的演化规律, 即随着传输距离的增加, 脉冲面积在最接近初始值的 π 的偶数倍附近振荡, 并趋向它。图 4 显示了失谐对光脉冲面积演化的影响, 失谐量越大, 脉冲开始传播的振荡幅度也越大, 然后才渐渐趋于 π 的偶数倍; 图 5 显示了不同横向弛豫时间对光面积演化的影响, 横向弛豫时间越小, 也就是相干时间越短, 光脉冲的面积就越快的趋向 π 偶数倍。

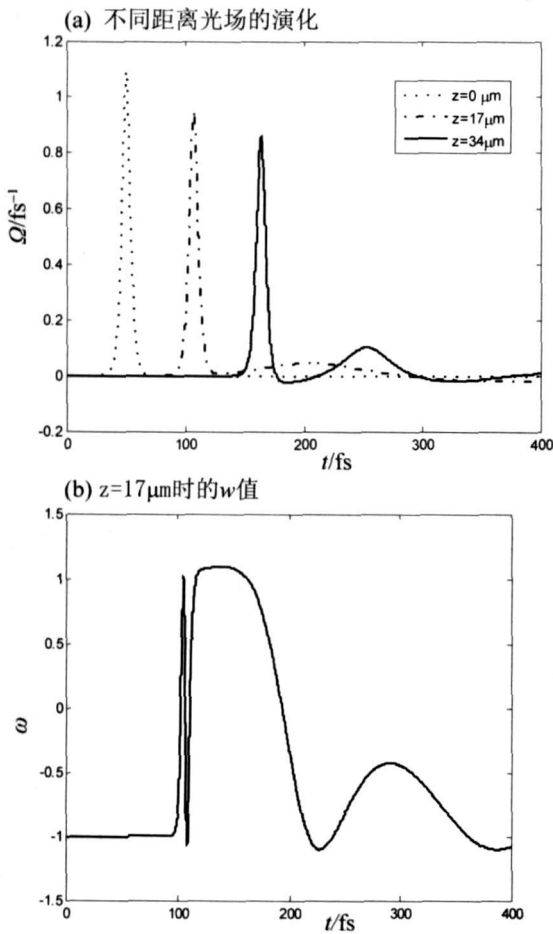


图 2 有限差分法求解 MB 方程的计算结果
Fig 2 The solution of MB equations using finite difference method

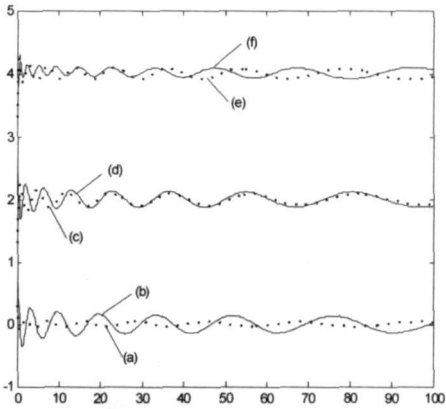


图 3 不同初始光面积随距离的演化
Fig 3 the pulse area varied with the original area
(a) $S_0 = 0.3\pi$; (b) $S_0 = 0.9\pi$; (c) $S_0 = 1.3\pi$;
(d) $S_0 = 2.9\pi$; (e) $S_0 = 3.3\pi$; (f) $S_0 = 4.9\pi$

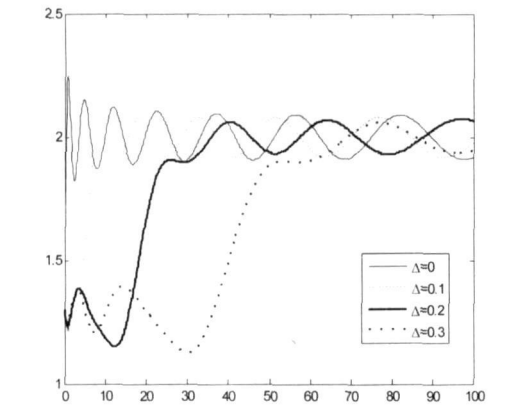


图 4 时不同失谐量对光脉冲面积的变化影响
Fig. 4 The pulse area varied with the detune

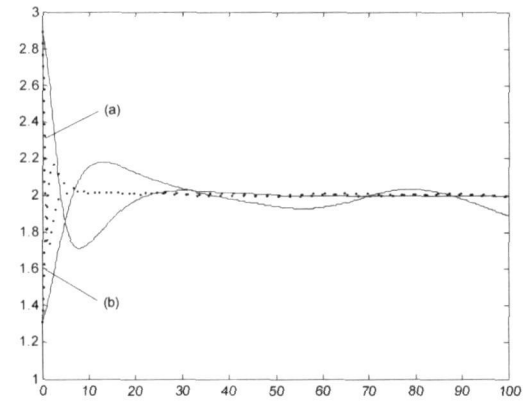


图 5 不同的横向弛豫时间对光脉冲面积的变化影响
实、虚线分别表示。(a) $S_0 = 2.9\pi$; (b) $S_0 = 1.3\pi$
Fig. 5 The pulse area varied with the transverse relaxation
Solid line dashed line denote respectively

图 3~5 可以看出, 总的来说, 光脉冲的传播的趋势是符合面积定理的, 即经过一定空间上的传

播后, 脉冲面积趋于 π 的偶数倍。但实际上, 光脉冲面积总是不能完全等于 π 偶数倍, 而是在 π 的偶数倍附近振荡, 所以面积定理只是反映了光脉冲面积变化的趋势。光脉冲面积的振荡周期, 振荡幅度的衰减快慢都是与初始面积、弛豫时间和失谐量有关的。

本文用有限差分法求解了二能级体系的 MaxwellBloch (MB) 耦合方程, MB 方程数值解的结果与 SG 方程孤子解的结果有很好的 consistency。验证了面积定理的基本规律, 研究了初始面积、失谐量和弛豫时间对光场面积演化的影响。所建立的方法对求解 MB 方程以及修正的这类微分方程组具有普适性。

参考文献:

[1] ALLEN L, EBERLY J H Optical resonance and two level atoms[M]. New York: Dover, 1987.
[2] 余向阳, 周建英. 飞秒相干瞬态过程的 Bloch 方程描述[J]. 中山大学学报: 自然科学版, 1999, 38: 24.
[3] 郭莹莹, 余向阳. 光学 Bloch 方程的数值解法[J]. 中山大学学报: 自然科学版, 2005, 44: 108-110.
[4] 程建春. 数学物理方程及其近似方法[M]. 北京: 科学出版社, 2004.
[5] SMITH G D Numerical solution of partial differential equation finite difference methods third edition[M]. Oxford University, 1985.
[6] XIAO Jian WANG ZhongYang XU Zhizhang Area evolution of a few-cycle pulse laser in a two-level atom medium[J]. Phys Rev A, 2002, 65: 031402.
[7] LAMB G J Jr, Analytical descriptions of ultrashort optical pulse propagation in a resonant medium[J]. Rev Mod Phys, 1971, 43: 99.

Numerical Methods and Application for MaxwellBloch Equations of Two-Level System

JIANG Yue YU Xiang Yang

(State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies
Sun Yat sen University Guangzhou 510275 China)

Abstract: The two-level system was described by the MaxwellBloch (MB) equations, which was solved by using finite difference methods numerically. The MB equations can be transformed to the normalized SineGordon (SG) equations while relaxation is neglected and resonance. The solution of MB equations was coherent with the soliton solution of SG equation. The result of finite difference methods was proved to be accurate and convergent, so the methods was applicable. It was used to analysis the propagation of ultra-short pulse in the two-level system, and the effect of the original area, relaxation and detune on the change of pulse area based on area theorem were studied.

Key words: Maxwell Bloch (MB) equations; two-level system; numerical methods of PDEs; area theorem