文章编号：1007-4627(2005)03-0300-04

原子受激态的Stokes参数分析*

刘义保[1,2]，庞文宁[1]，丁海兵[1]，尚仁成[1]
（1 清华大学物理系极化物理实验室，北京 100084；
2 东华理工学院物理系，江西 抚州 344000）

摘 要：根据密度矩阵理论，导出了受激原子态 P 态密度矩阵元和 P 态退激辐射的光子密度矩阵元的Stokes参数，它们之间存在一种非常简单直接的关系，说明在电子-光子符合散射实验中，通过测量光子的Stokes参数，就可以描述受激 P 态电荷云分布和散射过程的动力学。

关 键 词：密度矩阵；态多极；Stokes参数；电子-光子符合散射实验

中图分类号：O562.5　　**文献标识码**：A

1 引言

如何描述电子原子碰撞中的受激原子态，并使理论与实验可观察量进行关联，是原子分子碰撞物理学研究的一个热点。通过电子原子碰撞中散射电子与受激态退激辐射光子的符合测量，利用辐射光子的Stokes参数可以描述原子受激态的电荷云形状和散射动力学[1]。本文根据密度矩阵理论，引入态多极的概念，讨论了光子密度矩阵的Stokes表示，并以 $S\to P$ 态受激跃迁为例，导出 P 态的Stokes参数的密度矩阵表示，说明用Stokes参数可以直接描述受激的原子态。

2 光子密度矩阵的Stokes表示

光波是电磁波，单色电磁波可以用角频率、波矢及偏振态描述。$\boldsymbol{E}=A\boldsymbol{e}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$，其中 $\boldsymbol{e}=\cos\beta\boldsymbol{e}_x+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}-\sin\beta\boldsymbol{e}_y$ 是单位偏振矢量。按量子电动力学观点，与物质相互作用的波是由光子组成，用标识光子单一态矢量，把 $|e_x\rangle$ 和 $|e_y\rangle$ 设为基态，任意 $|e\rangle$ 可表示为

$$|e\rangle=a_1|e_x\rangle+a_2|e_y\rangle=\cos\beta|e_x\rangle+\sin\beta|e_y\rangle。\quad(1)$$

人们知道光子自旋为1，光子自旋沿光子运动方向只能取 $\lambda=+1,-1$，定义为旋度(helicity)，把 $\lambda=\pm1$ 的光子态称为旋态。在经典物理中，当圆偏振光束入射到电子组成的靶上时，靶上电子就会响应光波的转动电场而产生圆周运动，这说明在圆偏振和定义了角动量的光子之间存在关联。根据量子电动力学，定义了旋度的光子对应左、右手圆偏振光。我们采用这种协定：用 e_{+1} 和 $|+1\rangle$ 标注旋度为 $\lambda=1$ 的光子，称右手圆偏振光为正旋光；类似地，$\lambda=-1$，就标注为 e_{-1} 和 $|-1\rangle$，称左手圆偏振光为负旋光，这样偏振矢量为

$$\boldsymbol{e}_{\pm}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_x\pm\mathrm{i}\boldsymbol{e}_y),\quad(2)$$

偏振态为

$$|\pm1\rangle=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_x\rangle\pm\mathrm{i}|e_y\rangle),\quad(3)$$

逆变换为

$$|e_x\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle-|-1\rangle),\quad(4a)$$

$$|e_y\rangle=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(|+1\rangle-|-1\rangle)。\quad(4b)$$

用旋度代替 $|e_x\rangle$ 和 $|e_y\rangle$，这样偏振态的一般形式为

$$|e\rangle=a_1|+1\rangle+a_2|-1\rangle。\quad(5)$$

光子的偏振信息可以包含在相应的密度矩阵中。考虑一光束，由相互独立的态 $|e_a\rangle$ 和 $|e_b\rangle$ 两

收稿日期：2004-12-13；修改日期：2005-06-22
* 基金项目：国家自然科学基金资助项目(10134010)
作者简介：刘义保(1967—)，男(汉族)，江西南昌人，博士研究生，副教授，从事自旋极化电子与原子碰撞研究；
E-mail: liuybol@mails.tsinghua.edu.cn

束光子混合，强度分别为 I_a 和 I_b，总光束的密度矩阵定义如下[2]：

$$\rho' = w_a \mid e_a\rangle\langle e_a \mid + w_b \mid e_b\rangle\langle e_b \mid, \tag{6}$$

这里，$w_a = I_a/I$，$w_b = I_b/I$，$I = I_a + I_b$。为了得到密度矩阵，有必要选择一个特殊的表象，我们用旋态作为基矢，展开 $\mid e_a\rangle$ 和 $\mid e_b\rangle$：

$$\mid e_a\rangle = a_1{}^{(a)} \mid +1\rangle + a_2{}^{(a)} \mid -1\rangle, \tag{7a}$$

$$\mid e_b\rangle = a_1{}^{(b)} \mid +1\rangle + a_2{}^{(b)} \mid -1\rangle, \tag{7b}$$

其中，$a_{1,2}^{(a)}$ 表示 $\mid e_a\rangle$ 态展开系数，$a_{1,2}^{(b)}$ 表示 $\mid e_b\rangle$ 展开系数。利用厄密和共厄性，在旋度表象中的密度矩阵为

$$\rho' = \begin{pmatrix} w_a \mid a_1^{(a)} \mid^2 + w_b \mid a_1^{(b)} \mid^2 & w_a a_1^{(a)} a_2^{(a)*} + w_b a_1^{(b)} a_2^{(b)*} \\ w_a a_1^{(a)*} a_2^{(a)} + w_b a_1^{(b)*} a_2^{(b)} & w_a \mid a_2^{(a)} \mid^2 + w_b \mid a_2^{(b)} \mid^2 \end{pmatrix}。 \tag{8}$$

由上式并根据

$$\mathrm{tr}\,\rho' = w_a + w_b = 1 \tag{9}$$

得 ρ' 是归一化的。用这种方式归一化 ρ，用 I_a 和 I_b 代替 w_a 和 w_b：

$$\rho = I_a \mid e_a\rangle\langle e_a \mid + I_b \mid e_b\rangle\langle e_b \mid, \tag{10}$$

$$\mathrm{tr}\,\rho = I_a + I_b = I。 \tag{11}$$

用 Stokes 参数（η_1，η_2，η_3）可以完全测定任意给定光束的偏振态，参数的具体定义见文献[3]。下面用光子的 Stokes 参量表示态的密度矩阵元。用 $\rho_{\lambda'\lambda} \equiv \langle \lambda' \mid \lambda\rangle$ 标注 ρ 的矩阵元，

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{+1,+1} & \rho_{+1,-1} \\ \rho_{-1,+1} & \rho_{-1,-1} \end{pmatrix}。 \tag{12}$$

由(11)式得总光强：

$$I = \rho_{+1,+1} + \rho_{-1,-1}。 \tag{13}$$

为了得到 Stokes 参数 η_3，根据其定义 $\eta_3 = [I(0°) - I(90°)]/I$，得：

$$I(0°) = \langle e_x \mid \rho \mid e_x\rangle, \tag{14a}$$

$$I(90°) = \langle e_y \mid \rho \mid e_x\rangle。 \tag{14b}$$

把旋度表象中的 $\mid e_x\rangle$ 和 $\mid e_y\rangle$ 代入得：

$$I(0°) = \frac{1}{2}(-1, +1)\begin{pmatrix} \rho_{+1,+1} & \rho_{+1,-1} \\ \rho_{-1,+1} & \rho_{-1,-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\rho_{+1,+1} - \rho_{+1,-1} - \rho_{-1,+1} + \rho_{-1,-1}), \tag{15a}$$

$$I(90°) = \frac{1}{2}(-i, +i)\begin{pmatrix} \rho_{+1,+1} & \rho_{+1,-1} \\ \rho_{-1,+1} & \rho_{-1,-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} i \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\rho_{+1,+1} + \rho_{+1,-1} + \rho_{-1,+1} + \rho_{-1,-1})。 \tag{15b}$$

因此，

$$I\eta_3 = -(\rho_{+1,+1} + \rho_{-1,+1})。 \tag{16a}$$

类似地可得：

$$I\eta_1 = -i(\rho_{+1,+1} + \rho_{-1,+1}), \tag{16b}$$

$$I\eta_2 = \rho_{+1,+1} - \rho_{-1,+1}。 \tag{16c}$$

转换这些方程，用 Stokes 参数（η_1，η_2，η_3）表示光子的密度矩阵元为

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + \eta_2 & -\eta_3 + i\eta_1 \\ -\eta_3 - i\eta_1 & 1 - \eta_2 \end{pmatrix}。 \tag{17}$$

3　$S \to P$ 受激跃迁 P 态的密度矩阵

在我们论述的情况里，原子态有固定的总角动量 J_1，它可以用态多极 $\langle T(J)^{+}_{KQ}\rangle$[2,4,5] 表示，有关密度矩阵总是可以写成如下形式：

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{MM'} \mid JM'\rangle\langle JM' \mid \rho \mid JM\rangle\langle JM \mid \\ &= \sum_{\substack{MM' \\ K\Omega}} \langle T(J)^{+}_{KQ}\rangle(-1)^{J-M} \cdot \\ &\quad (JM', J-M \mid KQ) \mid JM'\rangle\langle JM \mid, \end{aligned} \tag{18}$$

其中态多极为

$$\langle T(J)^{+}_{KQ}\rangle = \sum_{M'M}(-1)^{J-M} \cdot (JM', J-M \mid KQ)\langle JM' \mid \rho \mid JM\rangle。 \tag{19}$$

原子由初态 J 被激发到末态 J_f，在 Θ 和 ϕ 探测到的光子的偏振强度分布（见文献[2]中方程(85)）为

$$I(\Theta,\ \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \| r \| J \rangle|^2 \Bigg(\frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \langle T(J)_{00}^{+} \rangle - \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{Bmatrix} [\mathrm{Re}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle \sin^2\Theta \cos 2\Phi - \mathrm{Re}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle \sin 2\Theta \cos\Phi + \sqrt{\frac{1}{6}} \langle T(J)_{20}^{+} \rangle (3\cos^2\Theta - 1)] + \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{Bmatrix} [\mathrm{Im}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle \sin^2\Theta \cos 2\Phi - \mathrm{Im}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle \sin 2\Theta \cos\Phi] \Bigg), \tag{20}$$

$$I_{\eta_3}(\Theta,\ \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \| r \| J \rangle|^2 \frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{Bmatrix} \times \{ [\mathrm{Re}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle (1+\cos^2\Theta) \cos 2\Phi + \mathrm{Re}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle \sin 2\Theta \cos\Phi + \sqrt{\frac{3}{2}} \langle T(J)_{20}^{+} \rangle \sin^2\Theta] - [\mathrm{Im}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle (1+\cos^2\Theta) \sin 2\Phi + \mathrm{Im}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle \sin 2\Theta \sin\Phi] \}, \tag{21a}$$

$$I_{\eta_1}(\Theta,\ \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \| r \| J \rangle|^2 \Bigg(\frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{Bmatrix} \times [\mathrm{Re}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle 2\cos\Theta \sin 2\Phi + \mathrm{Re}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle 2\sin\Theta \cos\Phi] + [\mathrm{Im}\langle T(J)_{22}^{+} \rangle 2\cos\Theta \cos 2\Phi + \mathrm{Im}\langle T(J)_{21}^{+} \rangle \sin\Theta \cos\Phi] \Bigg), \tag{21b}$$

$$I_{\eta_2}(\Theta,\ \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \| r \| J \rangle|^2 \frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{Bmatrix} \times [\mathrm{Im}\langle T(J)_{11}^{+} \rangle 2\sin\Theta \sin\Phi - \mathrm{Re}\langle T(J)_{11}^{+} \rangle 2\sin\Theta \cos\Phi + \sqrt{2} \langle T(J)_{10}^{+} \rangle \cos\Theta]。 \tag{21c}$$

以 $^1S \rightarrow {}^1P^0$ 激发跃迁，然后退激到 ^1S 态为例，利用 P 态密度矩阵，

$$\rho = \begin{pmatrix} f_{+1} f_{+1}^* & 0 & f_{+1} f_{-1}^* \\ 0 & 0 & 0 \\ f_{-1} f_{+1}^* & 0 & f_{-1} f_{-1}^* \end{pmatrix}。 \tag{22}$$

下面计算 P 态($L=1$) 的态多极(没有考虑 P 态轨道角动量和自旋角动量的耦合，用 L 代替 J)

$$\langle T(1)_{00}^{+} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|f_{+1}|^2 + |f_{-1}|^2), \tag{23a}$$

$$\langle T(1)_{10}^{+} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|f_{+1}|^2 - |f_{-1}|^2), \tag{23b}$$

$$\langle T(1)_{20}^{+} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|f_{+1}|^2 + |f_{-1}|^2), \tag{23c}$$

$$\langle T(1)_{22}^{+} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} f_{+1} f_{-1}^*, \tag{23d}$$

$$\langle T(1)_{11}^{+} \rangle = \langle T(1)_{21}^{+} \rangle = 0。 \tag{23f}$$

选择 $\Theta = 0$, $\Phi = 0$，即为电子-光子符合实验中垂直于散射平面的方向上探测光子。把计算所得态多极代入 Stokes 参数中，然后转换到 P 态的密度矩阵中，得其矩阵元的 Stokes 参数表示为

$$\rho = \sigma \frac{I}{2} \begin{pmatrix} 1+\eta_2 & 0 & -\eta_3 + \mathrm{i}\eta_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\eta_3 - \mathrm{i}\eta_1 & 0 & 1-\eta_2 \end{pmatrix}, \tag{24}$$

其中 $\sigma = |f_{+1}|^2 + |f_{-1}|^2$ 为散射截面。

4 讨论

上述散射激发的原子 P 态具有正反射对称性，其密度矩阵结构完全等效于沿 z 轴(垂直于散射平面，可参见文献[6])方向辐射的光子密度矩阵，说

明原子受激态退激辐射 Stokes 参数可与受激原子态的电荷云形状和散射过程动力学直接关联，从而建立了把散射实验可观察量（散射截面和 Stokes 参数）和量子散射理论的联系。当然，这里的辐射光子及其偏振参数是与散射过程和电子散射角对应的，电子-光子符合散射实验完全能够实现这种对应关系的测量[1,7]。需要说明的是，对于 $L>1$ 的激发态，就不是这种简单的关系，但是这种关联还是存在的，并且推广到了广义 Stokes 参数的测量[7—10]。

参 考 文 献：

[1] Andersen N, Bartschat K. Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collisions. New York: Springer, 1999, 133—187.

[2] Blum K. Density Matrix Theory and Applications(Sec Edi). New York: Plenum Press, 1996, 22—24.

[3] Born M, Wolf E. Principles of Optics (7th edition). New York: Pergamon Press, 1970, 24—37.

[4] Bartschat K, Bluml K, Hanne G F, *et al*. J Phys, 1981, **B14**: 3 761.

[5] Balashov V V, Grum-Grzhimailo N M. Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. New York: Kluwer Academic/Plenum Press, 2000, 1—31.

[6] Sohn M, Hanne G F. J Phys, 1992, **B25**: 4 627.

[7] Andersen N, Bartschat K, Hanne G F, *et al.* Phys Rev Lett, 1996 **76**: 208.

[8] Anderson N, Bartschat K, Hertel I V, *et al.* Phys Rep, 1997, **279**: 251.

[9] 刘义保，庞文宁，尚仁成等. 物理学进展, 2004, **24**(2): 138.

[10] 丁海兵，刘义保，尚仁成等. 物理实验, 2004, **24**(10): 12.

Analysis of Stokes Parameters in Atomic State Excited by Electrons*

LIU Yi-bao[1,2], PANG Wen-ning[1], DING Hai-bing[1], SHANG Ren-cheng[1]

(1 *Department of Physics, Tsinghua University, Beijing* 100084, *China*;

2 *Department of Physics, East China Institute of Technology, Fuzhou* 344000, *Jiangxi, China*)

Abstract: According to the density matrix theory, the density matrix of photon emitted from excited atom *P* state and of *P* state were introdued in this paper. There were a simple direct relation between the two density matrices, which shows that the electron cloud shape of excited atomic state and scattering dynamics can be described through the observable Stokes parameters of photon in electron-photon coincidence experiment.

Key words: density matrix; state multipole; Stokes parameter; electron-photon coincidence experiment

* **Foundation item**: National Natural Science Foundation of China(10134010)