П. В. Елютин. Теоретические основы квантовой радиофизики. Изд-во МГУ, 1982. (Theoretical Foundations of Quantum Radiophysics by P.V. Elyutin)

Елютин Павел Вячеславович, к.ф.-м.н., доцент МГУ,

Кафедра квантовой электроники,

http://phys.msu.ru/rus/about/staff/all/?ID=933

Читаемые курсы: "Теоретические основы квантовой радиофизики" (64 часа)"Теория колебаний II" (32 часа)"Нелинейная динамика" (32 часа)

Кафедра квантовой электроники (до 2001 года — квантовой радиофизики) была создана в 1978 г. в результате реорганизации кафедры волновых процессов после трагической гибели академика Р.В. Хохлова в 1977 г. После реорганизации образовались две кафедры — общей физики и волновых процессов под руководством С.А. Ахманова и квантовой радиофизики, которой вплоть до 2001 г. руководил академик Л.В. Келдыш. С 2002 г. заведующим кафедрой квантовой электроники является профессор В.И. Панов.



Теоретические основы квантовой радиофизики: Спецкурс для студентов 4-го и 5-го курса кафедры квантовой радиофизики

Продолжительность - 2 семестра. Отчетность - экзамен (после 2-го семестра). Обновленные версии конспектов лекции (весна-осень, 2010) добавляются по мере поступления.

Конспекты лекций, весенний семестр:

- Лекция 1 Основные определения
- Лекция 2 Гамильтониан. Нестационарная теория возмущений 1
- Лекция 3 Нестационарная теория возмущений 2. Золотое правило Ферми
- Лекция 4 Нестационарная теория возмущений 3. Ионизация. Золотое правило Ферми 2
- Лекция 5 Нестационарная теория возмущений 4. Линейная поляризуемость
- Лекция 6 Нестационарная теория возмущений 5. Линейная поляризуемость 2
- Лекция 7 Нестационарная теория возмущений 6. Линейная поляризуемость 3
- Лекция 8 Нестационарная теория возмущений 7. Высшие приближения

Лекция 9 Нестационарная теория возмущений - 8. Высшие приближения - 2. Альтернативы теории возмущений

Лекция 10 Двухуровневая система - 1

Лекция 11 Двухуровневая система - 2

- Лекция 12 Квазиэнергия. Трехуровневая система. Гармонический осциллятор
- Лекция 13 Гармонический осциллятор 2. Слабо нелинейный осциллятор
- Лекция 14 Слабо нелинейный осциллятор 2

Конспекты лекций, осенний семестр:

- Лекция 15 Итоги. Слабо нелинейный осциллятор в широкополосном поле
- Лекция 16 Теория релаксации
- Лекция 17 Теория релаксации 2
- Лекция 18 Теория релаксации 3
- Лекция 19 Теория релаксации 4. Динамика систем с релаксацией
- Лекция 20 Динамика систем с релаксацией 2. Сильное поле
- Лекция 21 Сильное поле 2
- Лекция 22 Сильное поле 3
- Лекция 23 Сильное поле 4
- Лекция 24 Сильное поле 5. Квантованное электромагнитное поле
- Лекция 25 Квантованное электромагнитное поле 2
- Лекция 26 Квантованное электромагнитное поле 3
- Лекция 27 Квантованное электромагнитное поле 4
- Лекция 28 Квантованное электромагнитное поле 5
- Лекция 29 Квантованное электромагнитное поле 6
- Лекция 30 Квантованное электромагнитное поле 7

ЛЕКЦИЯ #01 ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

§ 1.1 Содержание и цели курса

• Объекты и модели. В курсе рассматриваются задачи о взаимодействии простейших квантовых систем с электромагнитным излучением. В качестве простейших рассматриваются модели с небольшим числом степеней свободы N = 1...3, таких объектов, как

- свободный электрон;

- одноэлектронный атом (атом водорода или иной атом с одним оптическим электроном: атом щелочного металла, ион щелочноземельного);

- двухатомная молекула.

Эти модели мы будем называть *атомными системами* (S for System), а для краткости - *системами* или *атомами*. В отдельных случаях будут привлекаться модели трех- и многоатомных молекул. Но в общем граница нашего курса со спецкурсом "Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом" проходит примерно "по молекуле".

Электромагнитное поле (F for Field) действующего на систему излучения чаще всего будет описываться моделью плоской монохроматической электромагнитной волны. В отдельных случаях для описания немонохроматического излучения будут использоваться модели стационарного случайного процесса с непрерывным частотным спектром и многомодовая модель случайного процесса.

• *Приложения*. Рассматриваемые в курсе задачи представляют интерес для

1. Количественного описания экспериментов по взаимодействию лазерного излучения с **разреженными** средами (атомные пучки; разреженные газы) и одиночными объектами (электронами и атомами в ловушках);

2. Полуколичественного описания взаимодействия лазерного излучения с конденсированным веществом (с помощью экстраполяции зависимостей для разреженных сред).

• Цели курса. Курс имеет следующие цели.

1. Установить систему физических величин, используемых для описания взаимодействия, указать взаимосвязь и границы применимости основных понятий.

★ Примерами таких величин служат: вероятности перехода системы в другие состояния, поляризуемость системы, сечение рассеяния, скорость поглощения энергии системой и пр. 2. Указать способы получения параметрических и численных оценок основных величин, характеризующих взаимодействие атомов с излучением.

3. Описать систему наиболее употребительных элементарных моделей квантовой радиофизики и связанных с ними методов решения физических задач.

★ Следует помнить, что **не все** модели могут переноситься из одной теории в другую. Например, в теории дифракции используется модель "черного тела", полностью поглощающего весь падающий на него свет [ЛЛІІ, §61]. Что соответствует ей в макроскопической электродинамике? Рассмотрим отражение плоской волны от границы среды с комплексной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$. Из формул Френеля [ЛЛVІІІ, §86] для коэффициента отражения *R* при нормальном падении получается выражение

$$R = \frac{\left(n-1\right)^2 + \kappa^2}{\left(n+1\right)^2 + \kappa^2}, \qquad n+i\kappa = \sqrt{\varepsilon}.$$
(86.9)

Минимум $R(\varepsilon)$ достигается при n = 1, $\kappa = 0$, т.е. когда среда не отличается по своим свойствам от вакуума. Следовательно, на " ε -языке" про вещество с резкой пространственной границей нельзя сказать "абсолютно черное".

☆ На чем же тогда основан выбор материалов для покрытия "невидимых самолетов" (технология Stealth)?

• Могут возникнуть вопросы – почему одной задаче следует уделять столько времени? И для чего нужно так много методов?

① Во-первых, это оправдывается разнообразием результатов. Классическая задача о движении даже одномерного «атома» - частицы, связанной в постоянном (не зависящем от времени) потенциале и находящейся под влиянием переменного внешнего поля – есть задача с трехмерным фазовым пространством, которая может быть – и фактически оказывается – неинтегрируемой; в фазовом пространстве есть области динамического хаоса, т.е. закон движения становится очень сложным. Квантовая теория должна этой сложности подражать.

^② Во-вторых, все приближенные методы основаны на малости некоторых безразмерных параметров. Освоенная современным экспериментом область (например, на плоскости $\omega - \mathcal{E}$) настолько обширна, что перекрывает подчас по нескольку областей применимости методов. Нам встретится пример, где экспериментально доступная область перекрывается четырьмя разными приближениями.

§ 1.2 Основные приближения и модели

• Основное приближение. Совместное решение системы уравнений движения для частиц системы и электромагнитного поля, как правило, представляется недоступным.

★ Есть, впрочем, исключение - модель, описывающая взаимодействие двухуровневого атома с одной модой квантованного электромагнитного поля - модель Джейнса - Каммингса.

Основное упрощение связано с поэтапным решением: электромагнитное поле рассматривается на первом шаге как заданное действующее (внешнее, падающее) поле F_1 ; решается задача об эволюции системы S во внешнем поле. На втором шаге система S рассматривается как заданный источник поля и определяются характеристики ее излучения - рассеянного поля F_2 .

В ряде случаев (условия, выделяющие этот ряд, будут предметом особого внимания) для получения физически содержательных результатов необходимо учитывать взаимодействие системы S с ее *окружением* E (E for Environment), которое часто описывается как система с неопределенно большим (бесконечным) числом степеней свободы. Для простоты будет приниматься, что состояние окружения E не зависит ни от состояния системы S, ни от характеристик действующего поля F_1 . Например, удобно полагать, что E находится в состоянии термодинамического равновесия при известной температуре (такая модель окружения называется *термостатом*). Взаимодействие систем S и E приводит к необратимости эволюции S - переходу системы в состояние, не зависящее от начальных условий. Такие переходы называются процессами *релаксации*.

• Классификация моделей. Если отвлечься от системы E, то каждую из систем S, F_1 и F_2 можно описать как классической (c), так и квантовой (q) моделью. В результате возникает 8 возможностей, сведенных в таблицу 1.

Таблица 1.

	F_1	S	F_2	
1	С	С	С	Классическая электродинамика (*)
2	С	С	q	Модель заданных токов
3	С	q	С	Полуклассическая модель (*)
4	С	q	q	Спонтанное излучение в поле
5	q	С	С	?
6	<i>q</i>	С	q	Модель Вельтона
7	q	q	С	?
8	q	q	q	Квантовая модель (*)

Возможные типы моделей взаимодействия

Широкое распространение имеют модели 1, 3 и 8 (отметим, что в них для полей F_1 и F_2 используются модели одного типа). Модель 1 является чисто классической; она будет предполагаться известной и использоваться в квантовой радиофизике в качестве эталонной. Наличие альтернатив c - q описания подсистем ставит вопрос о практическом использовании принципа соответствия, а именно:

В каких условиях замена квантовой модели системы ее классическим аналогом не сказывается существенно на вычисленных значениях наблюдаемых физических величин?

§ 1.3 Оценки: основные параметры и шаблоны

◆ *Атомная система масштабов*. Основные фундаментальные константы, используемые в квантовой радиофизике, приведены ниже в таблице 2.

Масса электрона	т	9.11·10 ⁻²⁸ <i>г</i>
Масса протона	m_p	$1.67 \cdot 10^{-24} c$
Заряд электрона	е	$4.80 \cdot 10^{-10} \ C\Gamma C$
Скорость света	С	$3.00 \cdot 10^{10} \ см \ c^{-1}$
Постоянная Планка	ħ	1.05 · 10 ⁻²⁷ эрг с

Таблица 2.

Системы S - это в первую очередь атомы. Поэтому удобно вести расчеты в атомной системе единиц (системе Хартри), в которой основными масштабами служат заряд электрона e, масса электрона m и постоянная Планка \hbar .

Таблица 3. Масштабы атомной системы единиц

Масса	т	m	9.11·10 ⁻²⁸ <i>c</i>
Длина	a_o	$\hbar^2 m^{-1} e^{-2}$	5.29 · 10 ⁻⁹ см
Время	<i>t</i> _a	$\hbar^3 m^{-1} e^{-4}$	$2.42 \cdot 10^{-17} c$
Частота	ω _a	$\hbar^{-3}me^4$	$4.13 \cdot 10^{16} c^{-1}$
Энергия	E_a	$\hbar^{-2}me^4$	4.33 · 10 ⁻¹¹ эрг
Напряженность	\mathcal{E}_{a}	$\hbar^{-4}m^2e^5$	$1.72 \cdot 10^7 \Gamma avcc$
ПОЛЯ			5

Остальные две величины из таблицы 2 вводятся в систему Хартри через **безразмерные** параметры - постоянную тонкой структуры

'10

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} = 7.30 \cdot 10^{-3} \tag{1}$$

и (не имеющее общепринятого названия) отношение масс электрона и протона,

$$\zeta = \frac{m}{m_p} = \frac{1}{1836} = 5.44 \cdot 10^{-4}.$$
 (2)

★ Альтернативой атомной системе единиц является электронная система с основными масштабами e, m и c. Однако она не очень практична: ее масштаб длины - классический радиус электрона $r_0 = e^2 m^{-1} c^{-2} = \alpha^2 a_0 = 2.81 \cdot 10^{-13}$ см - слишком мал, а масштаб частоты $\omega_e = e^{-2}m c^3 = \alpha^{-3}\omega_a = 1.07 \cdot 10^{23} c^{-1}$ слишком велик для обычных задач квантовой радиофизики. Впрочем, величина $\sigma_c \sim r_0^2 \sim \alpha^4 a_0^2$, определяющая сечение рассеяния электромагнитной волны на свободном электроне [ЛЛІІ, §78], задает удобную опорную точку на шкале сечений.

• Шаблон оценок. Подавляющая часть собственных (не зависящих от параметров внешнего поля) характеристик атомных систем может быть представлена в виде

$$X = \# \alpha^{K} \zeta^{L} [X], \tag{3}$$

где **#** - числовой коэффициент, [X] - атомный масштаб нужной размерности. Основная задача параметрических оценок - определение показателей степеней K и L.

• Пример 1: оценка (статической) поляризуемости атома χ . По определению $d = \chi \mathcal{E} \Rightarrow [\chi] = L^3$. Величина χ не зависит от величины ζ (ядро атома м.б. ∞ тяжелым) и не зависит от α (эффект поляризации сохраняется и при $c \rightarrow \infty$). Итог: $K = L = 0, \ \chi \sim a_0^3$.

☆ Существует ли верхний предел значений статической поляризуемости атома в основном или первых возбужденных (не ридберговских) состояниях?

• Пример 2: оценка (статической) диамагнитной восприимчивости атома χ_m : по определению $m = \chi_m \mathcal{H} \Rightarrow [\chi_m] = L^3$. Величина χ_m не зависит от ζ (ядро атома м.б. ∞ тяжелым); воздействие поля на электроны - сила Лоренца - пропорционально $c^{-1} \sim \alpha$, отклик атома - магнитный момент - в определении содержит $c^{-1} \sim \alpha$. Итог: $K = 2, L = 0, \chi_m \sim \alpha^2 a_0^3$.

★ Формула (3) не универсальна: например, выражение для радиационного (лэмбовского) сдвига атомных термов содержит члены с зависимостью $\alpha^3 \ln \alpha$ [ЛЛІV, §123]. Если разложение имеет вид (3), то показатель степени *K* как правило целый. Показатель степени *L* отличен от нуля только в задачах, где существенно движение атомных ядер (например, в задачах о свойствах молекул). Значения *L* при этом почти всегда или целые, или полуцелые.

★ Формула (3) не универсальна: она может потерять эффективность вблизи резонансов между частотой поля и частотами переходов в системе. Из анализа простейших моделей следует, что в этой ситуации восприимчивость системы неограниченно

• *Модель поля.* Основная модель действующего на атом поля - плоская линейно поляризованная электромагнитная волна, в которой напряженности электрического и магнитного полей заданы выражениями

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right), \quad \vec{H} = \vec{H}_0 \cos\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right). \tag{4}$$

Поскольку размеры атома $a_0 \sim 10^{-8} \, cm$ малы по сравнению с длиной волны излучения оптического диапазона $\lambda \sim 10^{-4} \, cm$ (какой параметр обеспечивает эту малость?), пространственной зависимостью поля часто можно пренебречь. Далее, поскольку скорости электронов в атоме малы, $v_a/c \equiv \alpha \ll 1$, часто можно пренебречь влиянием магнитного поля и считать, что на атом действует только однородное электрическое поле, гармонически изменяющееся со временем:

$$\vec{E} \approx \vec{E}_0 \cos \omega t \,. \tag{5}$$

Это поле в основном характеризуется двумя параметрами - амплитудой *Е* и частотой *ω*. Все характеристики отклика могут быть представлены выражениями с шаблоном

$$X = \# \alpha^{K} \zeta^{L} [X] \mathscr{F} (\xi, \eta)$$
(6)

где $\mathscr{F}(\xi,\eta)$ - некоторая функция от связанных с масштабами поля безразмерных параметров

$$\xi = \frac{\mathscr{E}}{\mathscr{E}_a}, \qquad \eta = \frac{\omega}{\omega_a}. \tag{7}$$

Параметры электромагнитной волны могут меняться в широких пределах, и значения ξ и η могут быть как малы, так и велики. Современный рекорд пиковой интенсивности излучения лазера $I_{rec} = 6 \cdot 10^{20} Bm \ cm^{-2}$ [RSC+07], что соответствует $\xi \approx 130$. В оптическом диапазоне значение $\eta \sim 0.1 \ll 1$.

RSC+07 L. Robson , P. T. Simpson , R. J. Clarke *et al.* Scaling of proton acceleration driven by petawatt-laser – plasma interactions Nature Physics, 2007, v. 3, no. 1, pp.58–62.

Во многих задачах проявятся характерные масштабы напряженности электрического поля волны, которые в основном будут описываться шаблоном

$$\mathcal{E}^* = \# \alpha^K \zeta^L \eta^M [\mathcal{E}_a]. \tag{8}$$

Они будут разграничивать различные асимптотические области или ограничивать области применимости результатов. Для каждого масштаба

поле $\mathscr{E} \gg \mathscr{E}^*$ может в данной задаче считаться сильным. Нам встретятся характерные масштабы от

$$\min \mathcal{E}^* \sim \alpha^3 \eta^3 \mathcal{E}_a = 3.1 \cdot 10^{-11} \mathcal{E}_a \tag{9}$$

до

$$\max \mathscr{E}^* \sim \alpha^{-3} \mathscr{E}_a = 2.6 \cdot 10^6 \mathscr{E}_a \,. \tag{10}$$

☆ Задача. Представить в формате (8) масштаб напряженности поля в электронной системе с основными масштабами *е*, *m* и *с*.

• Стандарт оценок. Для единообразия оценок мы будем рассматривать поле излучения стандартного лазера - импульс неодимового ($\lambda = 1064 \text{ нм}$) лазера с (максимальной) интенсивностью $I_s = 10^8 \text{ Bm cm}^{-2}$ и длительностью $\tau_s = 10^{-8} \text{ c}$.

Таблица 4.

Стандартные		Значения в абс.	Значения в ат.
параметры		единицах	единицах
Интенсивность	I_s	10^{15} эрг см $^{-2}c^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-9}$
излучения			
Напряжен-	\mathcal{E}_{s}	$9.15 \cdot 10^2 \Gammaaycc$	$\xi = 5.3 \cdot 10^{-5}$
ность поля			
Частота	ω_s	$1.77 \cdot 10^{15} c^{-1}$	$\eta = 4.3 \cdot 10^{-2}$
Длительность	τ_s	$10^{-8} c$	$2.4 \cdot 10^{9}$
импульса			

В этом примере значения ξ и η малы, и функцию $\mathscr{F}(\xi, \eta)$ обычно можно аппроксимировать первым членом степенного разложения по ξ и η :

$$X = \# \alpha^{K} \zeta^{L} \xi^{M} \eta^{N} [X]$$
(11)

• Ридберговские атомы. Ранее мы подразумевали, что атомы находятся в основном или первых возбужденных состояниях. Уже давно (начиная примерно с 1973 г.) активно ведутся эксперименты с атомами, в которых один из электронов находится в состоянии с большим ($n \sim 50...100$) главным квантовым числом. Такие состояния называются ридберговскими. Свойства атомов в ридберговских состояниях (на жаргоне – ридберговских атомов) существенно зависят от n; соответственно, шаблон оценок меняется на $X = \# \alpha^K \zeta^L \xi^M \eta^N n^P [X]$.

• Пример 3: оценка (статической) поляризуемости ридберговского атома χ . По выводу примера 1, поляризуемость равна кубу эффективного поперечника атома. Из модели атома водорода $a \sim a_0 n^2$, откуда $\chi \sim a_0^3 n^6$.

• Пример 4. Для ридберговских атомов легко достижимы большие значения эффективного ξ - отношения напряженности внешнего поля к характерной величине действующего на электрон атомного поля. Поскольку $\mathscr{E}_{Ry} \sim ea^{-2} \sim \mathscr{E}_a n^{-4}$, то при n = 100 значение $\xi = 1$ достигается при интенсивности излучения $I \sim 1 Bm \ cm^{-2}$.

EOL 🔍

ЛЕКЦИЯ #02 МАСШТАБ СЕЧЕНИЯ ГАМИЛЬТОНИАН НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 1

§ 2.1 Масштаб сечения

Полученная в L1 размерная оценка (статической) поляризуемости атома $\chi \sim a_0^3$ позволяет получить масштаб сечения рассеяния света атомом. Используя простейшую модель поля (1.5) $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos \omega t$, для дипольного момента системы имеем $\vec{d}(t) = \chi \vec{E}_0 \cos \omega t$. Используя известное в классической теории [ЛЛП, §68] выражение для полной мощности излучения в дипольном приближении

$$\mathbf{P} = \frac{2}{3c^3} \ddot{\vec{d}}^2 \tag{1}$$

получаем (усреднив по времени при переходе к последнему равенству)

$$\mathbf{P} = \frac{2}{3c^3} \chi^2 \mathcal{E}^2 \omega^4 \cos^2 \omega t = \frac{1}{3c^3} a_0^6 \mathcal{E}^2 \omega^4.$$
(2)

По определению сечением рассеяния называется отношение (средней) мощности излучения к (средней) плотности мощности в падающей волне. Для него получаем

$$\sigma = \frac{\mathbf{P}}{I} = \frac{1}{3c^3} a_0^6 \mathcal{E}^2 \omega^4 \cdot \frac{8\pi}{c\mathcal{E}^2} = \frac{8\pi}{3c^4} a_0^6 \omega^4.$$
(3)

или, используя шаблон оценок (1.11),

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \alpha^4 \eta^4 a_0^2 \,. \tag{4}$$

Сечение рассеяния нерезонансного (низкочастотного) излучения на атоме гораздо меньше поперечника атома (в стандартных условиях $\sigma = 2.55 \cdot 10^{-14} \pi a_0^2$) и существенно меньше сечения (томсоновского) рассеяния на свободных электронах [ЛЛІІ, §78]

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} \alpha^4 a_0^2. \tag{5}$$

(в стандартных условиях $\sigma = 3.35 \cdot 10^{-6} \sigma_T$).

В дальнейшем нам встретятся сечения как много большие, так и много меньшие, чем (4).

§ 2.2 Гамильтониан

• Будем описывать систему *S* в одночастичном приближении, решая задачу о движении электрона в заданном электромагнитном поле. Статическое поле ядра или атомного остова зададим скалярным потенциалом $\Phi(\vec{r})$. Поле действующего на систему излучения F_1 будем задавать векторным потенциалом $\vec{A}(\vec{r},t)$,

$$\vec{A}(\vec{r},t) = A\vec{e}\sin\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right),\tag{6}$$

где волновое число $|\vec{k}| = \omega/c$, а \vec{e} есть вектор поляризации. Электрическое $\vec{E}(\vec{r},t)$ и магнитное $\vec{H}(\vec{r},t)$ поля связаны с векторным потенциалом соотношениями

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{H} = \operatorname{rot} \vec{A}.$$
 (7)

Функция Лагранжа для частицы в электромагнитном поле (в нерелятивистском приближении) есть [ЛЛП, §16]

$$L = \frac{m\vec{v}^2}{2} + \frac{e}{c}\vec{A}\vec{v} - e\Phi$$
(8)

Обобщенный импульс частицы

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A}$$
(9)

Функция Гамильтона определяется выражением

$$H = \vec{v}\frac{\partial L}{\partial \vec{v}} - L = \frac{m\vec{v}^2}{2} + e\Phi$$
(10)

Выражая ее через обобщенный импульс и используя правило замены канонических декартовых переменных на операторы с каноническими коммутационными соотношениями, получаем гамильтониан системы

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e \Phi(\vec{r}) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$
(11)

Для гамильтониана невозмущенной системы,

$$\hat{H}_{0} = \frac{\hat{\vec{p}}^{2}}{2m} + e\Phi(\vec{r}), \qquad (12)$$

дискретный энергетический спектр $E_n \equiv \hbar \omega_n$ и ВФ стационарных состояний $\varphi_n(\vec{r})$ будут в дальнейшем считаться известными. Оператор, зависящий от характеристик поля излучения,

$$\hat{V}_{pA}(t) = -\frac{e}{mc}\hat{\vec{p}}\vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2, \qquad (13)$$

будем называть возмущением. Такой вид оператора возмущения называется *pA-формой* (а также калибровкой скорости или минимальной связью).

★ Оценка отношения *r* второго и первого членов в операторе возмущения (13) для атомной системы и лазерного импульса имеет вид

$$r \sim \frac{\mathscr{E}}{\mathscr{E}_a} \cdot \frac{\omega_a}{\omega} = \xi \eta^{-1}. \tag{14}$$

В стандартном случае это отношение мало: $r_s = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Заметим, что нетрудно обеспечить выполнение условия $r \ge 1$ как за счет увеличения амплитуды поля \mathscr{E} , так и за счет уменьшения частоты ω . Заметим также, что малость второго члена не всегда означает возможность им пренебречь: есть процессы, в описании которых он играет доминирующую роль.

• Если размеры атомной системы малы в сравнении с длиной волны излучения, и поле электромагнитной волны может быть описано как однородное переменное электрическое поле, $\vec{E}(\vec{r},t) \approx \vec{E} \cos \omega t$, а векторный потенциал – как однородное переменное поле $\vec{A}(t) \approx -A\vec{e} \sin \omega t$ (такое приближение называется электрическим дипольным или просто дипольным).

Уравнения движения классической системы не изменятся, если к функции Лагранжа добавить полную производную по времени [ЛЛІ, §2]. Заменим функцию Лагранжа (8) на

$$L' = L - \frac{d}{dt} \left\{ \frac{e}{c} \vec{r} \vec{A} \right\} = \frac{m \vec{v}^2}{2} - e\Phi - \frac{e}{c} \vec{r} \vec{A}.$$
(15)

Тогда соответствующий гамильтониан будет иметь вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + e\Phi(\vec{r}) + \frac{e}{c}\hat{\vec{rA}}(t) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}_{dE}(t).$$
(16)

Оператор возмущения теперь имеет вид

$$\hat{V}_{dE}(t) = -\hat{\vec{d}}\vec{E}(t), \qquad (17)$$

где $\hat{\vec{d}} = e\hat{\vec{r}}$ есть оператор *дипольного момента*. Такой вид оператора возмущения называется *dE*-формой (или калибровкой длины, или прямой связью). Хотя выражения (13) и (17) формально эквивалентны,

[☆] Сравнить вытекающие из (10) и классического аналога (16) уравнения движения для вектора координаты; сравнить вытекающие из (11) и (16) гейзенберговские уравнения для оператора координаты.

иногда их использование может привести к неэквивалентным результатам, так что необходимо быть настороже.

Вычислить матричные элементы операторов $\hat{V}_{pA}(t)$ и $\hat{V}_{dE}(t)$ для перехода между состояниями 1s и 2p в атоме водорода в стандартном поле излучения. Какой из матричных элементов больше – и во сколько раз?

В общем случае вопрос об эквивалентности форм (8) и (12) весьма сложен и многие годы остается предметом дискуссий (см. [<u>Б</u>84, RZ04]).

□ [<u>Б</u>84] Быков В.П.

Форма гамильтониана и начальные условия в излучательных задачах УФН, 1984, т. 143, вып. 4, сс. 657-682.

[RZ04] K. Rzazewskiy and R.W. Boyd Equivalence of interaction Hamiltonians in the electric dipole approximation J. Modern Optics, 2004, v. 51, no. 8, pp. 1137–1147

Форма (17) предпочтительнее, если область пространственной локализации атомной системы мала - например, система находится в суперпозиции состояний дискретного спектра. Формой (13) мы будем пользоваться, если область пространственной локализации атомной системы велика - например, система находится в состояниях непрерывного спектра.

• Для выхода за рамки дипольного приближения в операторе возмущения pA-формы достаточно восстановить зависимость векторного потенциала от пространственных координат: $\vec{A}(t) \rightarrow \vec{A}(\vec{r},t)$. Уточнение оператора dE-формы приводит к мультипольному разложению (ср. [ЛЛІІ, §§42,45]):

$$\hat{V}(t) = -\hat{\vec{d}}\vec{E} - \frac{1}{2}\hat{Q}_{\alpha\beta}\left(\nabla_{\alpha}E_{\beta}\right) - \hat{\vec{m}}\vec{H} + \dots$$
(18)

где $\hat{Q}_{\alpha\beta} = e\hat{r}_{\alpha}\hat{r}_{\beta}$ есть компонента тензора оператора (электрического) *квадрупольного момента*, а оператор *магнитного* (дипольного) *момента* $\hat{\vec{m}} = \mu_0 \left(\hat{\vec{l}} + 2\hat{\vec{s}}\right)$, где $\hat{\vec{l}}$ - оператор орбитального момента, $\hat{\vec{s}}$ - спина, а

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9.27 \cdot 10^{-21} \text{ spr } \Gamma aycc^{-1}$$
(19)

есть магнетон Бора.

§ 2.3 Нестационарная теория возмущений

• Эволюция атомной системы *S* описывается нестационарным уравнением Шредингера (УШ)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right] \Psi.$$
(20)

В ряде случаев это уравнение может быть решено с помощью *нестационарной теории возмущений* (НТВ). Основу метода НТВ составляют:

① - разложение ВФ системы $\Psi(\vec{r},t)$ по модам - по базису стационарных состояний невозмущенной системы:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{m} a_m(t) \varphi_m(\vec{r}) e^{-i\omega_m t}; \qquad (21)$$

☆ Для упрощения записи в разложении (21) игнорируются вклады от состояний непрерывного спектра. Малостью какого параметра можно оправдать такое упрощение?

 \therefore Принято выделять в членах разложения (21) экспоненциальные множители. Зачем это нужно - ведь любая зависимость от времени может быть учтена выражением $a_m(t)$?

2 - проектирование разложения на функции базиса, приводящее к системе уравнений для амплитуд:

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_m a_m V_{km}(t) e^{i\omega_{km}t},$$
(22)

где матричные элементы возмущения суть

$$V_{km}(t) = \int \varphi_k^*(\vec{r}) \hat{V}(\vec{r}, t) \varphi_m(\vec{r}) d\vec{r} , \qquad (23)$$

а частоты переходов

$$\omega_{km} = \omega_k - \omega_m = \hbar^{-1} (E_k - E_m).$$
⁽²⁴⁾

Э - решение системы уравнений для амплитуд (22) итерациями обычно с начальными условиями

$$a_k(t_0) = \delta_{kn}, \tag{25}$$

где δ_{kn} - символ Кронекера, соответствующими случаю, когда система *S* с достоверностью находится в одном из стационарных состояний.

🛪 Чем с физической точки зрения выделены начальные условия (25)?

★ Перечисленные выше шаги не содержат приближений. Приближенный характер расчетов по НТВ возникает при удержании в итерационном разложении конечного числа членов. Другой подход (который нами не будет использоваться) состоит в суммировании бесконечного числа асимптотических выражений для членов ряда НТВ.

• Первый порядок НТВ. При подстановке (25) в правую часть системы (22) последняя распадается на независимые уравнения, которые элементарно интегрируются и дают в первом порядке

$$a_{k}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt'.$$
(26)

Вероятность перехода системы W_{nk} к моменту t в состояние $|k\rangle$ определяется квадратом модуля соответствующей амплитуды:

'10

$$W_{nk} = \left| a_k(t) \right|^2 = \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt' \right|^2.$$
(27)

Рассмотрим важный частный случай, когда начальные условия задаются в далеком прошлом (до включения возмущения), а состояние системы определяется в далеком будущем (после выключения возмущения). Тогда, используя определение преобразования Фурье функции f(t),

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$
(28)

получаем

$$W_{kn} = \frac{|V_{kn}|^2}{\hbar^2} |2\pi g(-\omega_{kn})|^2$$
(29)

Вероятность перехода пропорциональна квадрату модуля амплитуды фурье-компоненты возмущения на частоте перехода (с обратным знаком). Переход с повышением энергии ($\omega_{kn} > 0, E_k > E_n$) вызывается спектральной компонентой отрицательной частоты, а переход с уменьшением энергии ($\omega_{kn} < 0, E_k < E_n$) – компонентой положительной частоты. Если f(t) - вещественная функция времени, то эти вероятности равны.

• Если функция f(t) гладкая (не имеет особенностей на действительной оси), то ее фурье-компоненты на высоких частотах спадают экспоненциально (или быстрее – например, по гауссову закону), и вероятности возбуждения медленными воздействиями оказываются пренебрежимо малы.

Если f(t) имеет особенности на действительной оси (производные f до $f^{(k-1)}$ включительно непрерывны, а $f^{(k)}$ имеет скачок величины $\Delta f^{(k)}$; считается, что $f^{(0)} = f$), то при больших ω фурье-образ будет иметь асимптотику

$$g(\omega) \propto \frac{\Delta f^{(k)}}{\left(-i\omega\right)^{k+1}}$$
 (30)

(эту формулу можно доказать интегрированием по частям в определении $g(\omega)$).

☆ Проверить применимость формулы (30) при k = -1 (скачок испытывает интеграл от функции f(t)).

Степенная малость далеких фурье-компонент, в отличие от экспоненциальной, может привести к сильно завышенным оценкам вероятностей переходов. Поэтому использование для расчетов вероятностей переходов (да и вообще для любых задач, где ответ определяется фурьеинтегралом) моделей типа ступенчатых импульсов весьма опасно.

★ Следует помнить, что физические «скачки» занимают конечное время τ_J , и формула (30) применима лишь при $\omega \tau_J \ll 1$. В области $\omega \tau_J \gg 1$ спектральная амплитуда будет спадать экспоненциально, $g(\omega) \propto \exp(-\#\omega \tau_J)$.

§ 2.4 Гармоническое поле: первый порядок

• При рассмотрении взаимодействия атомной системы с гармоническим полем - см. формулы (6),(7),(13) и (17) - принято выделять два случая.

О Начальные условия заданы при $t_0 = -\infty$, амплитуда поля бесконечно медленно увеличивается (*адиабатическое включение* поля):

$$\hat{V}_0 = \lim_{\epsilon \to 0} \hat{V} \cos \omega t \, e^{\epsilon t} \,. \tag{31}$$

⁽²⁾ Начальные условия заданы при $t_0 = 0$ (*внезапное включение* поля)

$$\hat{V}_1 = 0$$
 $(t < 0), \quad \hat{V}_1 = \hat{V} \cos \omega t \quad (t > 0).$ (32)

При вычислении интеграла в (26) оба случая можно рассматривать одновременно:

$$a_{k}(t) = -\frac{V_{kn}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} - \sigma}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} - \sigma}{\omega_{kn}-\omega} \right]$$
(33)

Здесь параметр $\sigma = 0$ для адиабатического и $\sigma = 1$ для внезапного включений поля. Введем обозначение $\Delta = \omega_{kn} - \omega$ для *расстройки* частот перехода и поля. Аналогично введем $\Sigma = \omega_{kn} + \omega$.

★ Если $\omega_{kn} > 0$ (переход идет в состояние с большей энергией), то основной вклад в амплитуду дает второе слагаемое в (33), которое порождается компонентой **отрицательной** частоты в функции $\cos\omega t$. При квантовом описании поля (см. L~24) такие компоненты соответствуют **поглощению** кванта (фотона). Однако и противоположные процессы, при которых **увеличение** энергии сопровождается **излучением** фотона, имеют ненулевую вероятность. Дело в том, что для системы с зависящим от времени гамильтонианом (неавтономной системы) закон сохранения энергии не имеет места. • Вероятности переходов даются для обоих типов включения поля громоздким выражением

'10

$$W_{\sigma} = \frac{\left|V_{kn}\right|^{2}}{4\hbar^{2}} \begin{bmatrix} \frac{1 - 2\sigma\cos\Sigma t + \sigma^{2}}{\Sigma^{2}} + \frac{1 - 2\sigma\cos\Delta t + \sigma^{2}}{\Delta^{2}} + \\ + 2\frac{\cos2\omega t - \sigma(\cos\Sigma t + \cos\Delta t) + \sigma^{2}}{\Sigma\Delta} \end{bmatrix}, \quad (34)$$

где $\sigma = 0$ или 1 для адиабатического и внезапного включений соответственно. Вероятности переходов осциллируют вокруг средних значений \overline{W}_{σ} , которые различны для разных способов включения поля:

$$\overline{W_{0}} = \frac{|V_{kn}|^{2}}{2\hbar^{2}} \cdot \frac{\omega_{kn}^{2} + \omega^{2}}{\left(\omega_{kn}^{2} - \omega^{2}\right)^{2}}, \qquad \overline{W_{1}} = \frac{|V_{kn}|^{2}}{2\hbar^{2}} \cdot \frac{3\omega_{kn}^{2} + \omega^{2}}{\left(\omega_{kn}^{2} - \omega^{2}\right)^{2}}.$$
 (35)

Если $\Delta \ll \omega$, то $\overline{W_1} \approx 2\overline{W_0}$.

☆ В модели внезапного включения поля фаза поля привязана к моменту включения. Естественно рассмотреть внезапное включение поля со случайной фазой:

$$\hat{V}_2 = 0$$
 $(t < 0), \quad \hat{V}_2 = \hat{V} \cos(\omega t + \varphi) \ (t > 0)$

где фаза φ - случайная величина, равномерно распределенная на интервале [0,2 π]. Вычислить **среднюю** по ансамблю вероятность перехода $\overline{W_2}$ в таком поле и сравнить результат с $\overline{W_0}$ и $\overline{W_1}$.

Формула (33) вводит масштаб обратного времени - частоту Раби

$$\Omega_{kn} = \frac{V_{kn}}{\hbar}.$$
(36)

Индексы у Ω_{kn} далее часто будем опускать. Если $\hat{V}(t) = -\hat{d}\vec{E}\cos\omega t$, то $\Omega = d_{kn} \mathcal{E}\hbar^{-1}$. Для переходов в атомах вблизи основного состояния примем как стандартную оценку дипольного момента $d_s = ea_0 = 2.5 \cdot 10^{-18}$ СГС. Тогда в стандартном поле $\Omega_s = 2.4 \cdot 10^{12} c^{-1} = 1.3 \cdot 10^{-3} \omega_s$.

• Обсудим применимость теории возмущений. Вектор состояния, построенный в первом порядке НТВ, не нормирован: $\|\Psi\|^2 = 1 + \Sigma W_{nk}$. Такое выражение приемлемо, если $\Sigma W_{nk} \ll 1$ и, в частности, для любого k $W_{nk} \ll 1$. Последнее условие будет выполнено при любых t, если выполнено неравенство

$$\beta = \frac{\Omega_{nk}}{\Delta_{nk}} \ll 1.$$
(37)

Параметр β есть малый параметр НТВ. Для низших уровней атомов расстояние между уровнями порядка частоты оптического поля ω, и для

взятых наудачу частот $\Delta_{nk} \sim \omega$. В стандартном случае получается $\beta_s \sim 10^{-3}$. Однако при любой заданной величине напряженности поля неравенство (37) будет нарушено при $\Delta \rightarrow 0$ - в *резонансном случае*.

★ Неравенство (37) является необходимым, но недостаточным условием эффективности применения теории возмущений: малые разности частот в знаменателях выражений для амплитуд могут возникнуть при вычислении членов высших порядков.

При этом выражением (34) все еще можно пользоваться для случая внезапного включения поля при достаточно малых временах t. При $\Delta << \Omega << \omega$ главным является второй член в (34); при $\Delta t << 1$ получаем

$$W_1 = \frac{\Omega^2}{4} \cdot \frac{2 - 2\cos\Delta t}{\Delta^2} \approx \frac{\Omega^2}{4} t^2.$$
(38)

Вероятность перехода между уровнями дискретного спектра под действием гармонического возмущения с частотой, близкой к резонансу, квадратично растет со временем.

 \therefore Почему можно пренебречь первым и третьим членами в (34), хотя при $t \to 0$ их вклады в вероятность перехода имеют примерно ту же величину, что и вклад второго члена?

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #03 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 2 ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПОЛЕ ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ

TEST 01

§ 3.1 Квадратичный распад. Квантовый эффект Зенона.

• Особый интерес представляет случай перехода под действием гармонического поля в плотный дискретный спектр (а в пределе – в непрерывный спектр). В этом случае условие применимости ТВ (2.37) может одновременно нарушаться для многих конечных состояний, и целесообразно рассматривать внезапное включение поля ($\sigma = 1$).

Измеряемой в эксперименте величиной часто является суммарная вероятность во все конечные состояния.

Рассматривая переход из начального состояния $|n\rangle$ в выше лежащие состояния $|k\rangle$, так что $\omega_{kn} > 0$, мы можем сохранить в формуле (2.34) только важнейший, второй член:

$$W_{\Sigma} = \sum_{k} \frac{|V_{kn}|^{2}}{4\hbar^{2}} \left[\frac{1 - 2\sigma \cos \Delta_{k} t + \sigma^{2}}{\Delta_{k}^{2}} \right] = \sum_{k} \frac{|V_{kn}|^{2}}{\hbar^{2}} \left[\frac{\sin^{2} \frac{\Delta_{k} t}{2}}{\Delta_{k}^{2}} \right].$$
(1)

При малых временах (таких, что для всех $|k\rangle$, для которых матричные элементы $|V_{kn}|^2$ дают существенный вклад в сумму, можно считать $\Delta_k t \ll 1$) можно заменить в последнем члене синус его аргументом, и тогда

$$W_{\Sigma} = \sum_{k} \frac{\left| V_{kn} \right|^{2}}{4\hbar^{2}} t^{2} = \frac{\left| V_{nn}^{2} \right|}{4\hbar^{2}} t^{2}.$$
 (2)

Таким образом, вероятность сохранения системы в исходном состоянии $W_0 = 1 - W_{\Sigma}$ убывает по закону

$$W_0 = 1 - \Sigma t^2 \,. \tag{3}$$

Хотя интервал времени, на котором применимо выражение (3), обычно невелик, такой закон убывания начальной вероятности (закон распада) имеет принципиальное значение.

Пусть при t = 0 проведено измерение, установившее наличие системы в начальном состоянии, а в момент $t = \theta$ оно повторено. Вероятность остаться в начальном состоянии

$$W_0^{(1)} = 1 - \Sigma \theta^2 \approx \exp\left(-\Sigma \theta^2\right). \tag{4}$$

Пусть теперь повторные измерения проведены дважды – в моменты $t = \theta/2$ и $t = \theta$. Вероятность остаться в начальном состоянии теперь равна

$$W_0^{(2)} = \left[1 - \Sigma \left(\frac{\theta}{2}\right)^2\right]^2 \approx \exp\left(-\frac{\Sigma \theta}{2}^2\right).$$
 (5)

Проведенные на том же интервале θ в эквидистантные моменты K измерений уменьшат вероятность распада в K раз и могут сделать ее сколь угодно малой. Это явление называется квантовым эффектом Зенона [MS77, <u>X</u>90].

- [MS77] B. Misra and E.C.G. Sudarshan The Zeno's paradox in quantum theory J. Math. Phys., 1977, v. 18, no. 4, p. 756 – 763
- [X90] Л.А. Халфин Квантовый эффект Зенона УФН, 1990, т. 160, вып. 10, с. 185 – 188.

Величину $\tau_Z = 1/\sqrt{\Sigma}$ называют *временем Зенона*.

§ 3.2 Линейный распад. Золотое правило Ферми.

★ Суммарная вероятность перехода в резонансные состояния $W_{\Sigma} \sim N_r(t)\Omega^2 t^2$, где $N_r(t)$ - число состояний, остающихся в резонансе к моменту t. Если δ - среднее спектральное расстояние между соседними уровнями, то $N_r(t) \sim (\delta t)^{-1}$. В итоге $W_{\Sigma} \sim \Omega^2 \delta^{-1} t$. Скорость перехода в резонансные состояния $\dot{W}_{\Sigma} \sim \Omega^2 \delta^{-1}$ постоянна. Ее количественный расчет будет нашей ближайшей задачей.

• При бо́льших временах, но таких, что ширина пика тригонометрической функции больше расстояния между соседними уровнями, суммирование в (1) можно заменить интегрированием:

$$\sum_{k} f(k) \to \int f(E_k) \rho(E_k) dE_k = \int f(E_k) \rho(E_k) d(\hbar \omega_k), \quad (6)$$

где $\rho(E_k)$ - энергетическая плотность (конечных) состояний. В этом случае обычно можно пренебречь зависимостью матричных элементов и плотности состояний от энергии и считать их постоянными, равными

значениям V_{kn} и $\rho(E_k)$ для состояния с минимальной расстройкой. Тогда интегрирование дает

$$W_{\Sigma} = \frac{\left|V_{kn}\right|^{2}}{\hbar^{2}} \rho\left(E_{k}\right) \cdot \frac{\pi}{2} t \cdot \hbar = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\left|V_{kn}\right|^{2}}{4} \rho\left(E_{k}\right) t.$$
(7)

Традиционно принято выбирать возмущение со временной зависимостью $\hat{V}e^{-i\omega t}$, что увеличивает матричный элемент в два раза по сравнению с нашим случаем, и оформлять (7) как утверждение о постоянстве суммарной скорости переходов:

$$\dot{W}_{\Sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kn}|^2 \rho(E_k).$$
(8)

Формула (8) называется золотым правилом Ферми.

★ Для вывода (8) существенно суммирование по конечным состояниям с разной энергией – но не обязательно суммирование по всем остальным квантовым числам.

★ Согласно (8), закон распада начальной вероятности имеет вид

$$W_0 = 1 - \Gamma t \,, \tag{9}$$

где для краткости обозначено $\dot{W}_{\Sigma} = \Gamma$. Формулы (3) и (9) можно интерполировать законом

$$W_0 = 1 - \frac{\Gamma t^2}{\tau_J + t} \tag{10}$$

где τ_J - время кроссовера между квадратичным (3) и линейным (9) законами распада. Сравнивая (3) и (10) при малых t, получаем

$$\tau_J = \frac{\Gamma}{\Sigma} = 2\pi |V_{kn}|^2 \left(|V_{nn}^2| \right)^{-1} \hbar \rho(E_k).$$
(11)

По современным представлениям [Sch97], время τ_J представляет оценку продолжительности квантового перехода из начального в конечное состояние и называется временем прыжка.

[Sch97] L.S. Schulman

Observational line broadening and the duration of a quantum jump J. Phys. A: Math. Gen. 1997, v.30, no. 9, L293-L299

Логика такого определения понятна: если внешнее вмешательство (серия измерений) может изменить кинетику перехода из начального состояния – значит, этот переход еще не завершен. Заметим, что τ_J зависит от структуры матричных элементов и значения плотности состояний, но не от величины возмущения.

• Если значение энергии $E_k = E_n + \hbar \omega$ принадлежит области непрерывного энергетического спектра, то можно формально сделать спектр системы *S* дискретным, погрузив ее в куб с большим ребром *L* и подчинив

ВФ на стенках куба граничным условиям (непроницаемости стенок или периодичности ВФ). Плотность конечных состояний при этом неограниченно растет при увеличении L, и переход (6) оправдан при сколь угодно больших временах. Если же значение $E_k = E_n + \hbar \omega$ принадлежит области дискретного спектра с большой, но конечной плотностью состояний, то замена (6) теряет корректность при временах, бо́льших чем

$$\tau_H = 2\pi\hbar\rho(E_k). \tag{12}$$

Этот масштаб называется временем Гейзенберга. Он задает минимальное время измерения, необходимое для того, чтобы разрешить спектральный интервал $\hbar\Delta$ между соседними уровнями. Иначе: до наступления времени Гейзенберга дискретность энергетического спектра не существенна.

§ 3.3 Квазиконтинуум энергетического спектра

• Золотое правило Ферми (8) получено в первом порядке теории возмущений в предположении, что населенность начального состояния $W_n = |a_n|^2$ остается неизменной, $W_n \equiv 1$. Более последовательное описание должно учитывать изменение населенности основного состояния. Скорость перехода в состояния непрерывного спектра пропорциональна населенности начального состояния. Считая скорость перехода малой, можно записать *балансное уравнение*

$$\frac{dW_n}{dt} = -\dot{W}W_n. \tag{13}$$

Решение этого уравнения с начальным условием $W_n(0) = 1$ есть

$$W_n(t) = \exp(-\dot{W}t). \tag{14}$$

При переходах в непрерывный спектр под действием монохроматического поля населенность начального состояния убывает со временем по экспоненциальному закону.

☆ По сравнению с чем должна быть мала скорость перехода \dot{W} для применимости балансного уравнения (13)?

• Решение (14) показывает, что при учете необратимого процесса перехода в непрерывный спектр начальное состояние (дискретного спектра) из стационарного превращается в квазистационарное, не имеющее точно определенной энергии - а потому позволяющее резонансные переходы в полосу конечной ширины. Этот эффект носит в теории ионизации название ионизационного уширения уровней.

Если начальное состояние распадается с постоянной скоростью, то можно положить

$$a_n(t) = e^{-\gamma t}, \qquad (15)$$

где $\gamma = \dot{W}/2$. Подставляя это выражение в (2.22) и интегрируя, получаем для вероятности перехода в состояние $|k\rangle$

$$W_{k} = \frac{\left|V_{nk}\right|^{2}}{4} \left[\frac{1 - 2e^{-\gamma t} \cos \Delta_{k} t + e^{-2\gamma t}}{\Delta_{k}^{2} + \gamma^{2}}\right].$$
 (16)

Интегрируя по Δ и используя значение $\gamma = \dot{W}/2$, получаем для суммарной населенности конечных состояний

$$W_{\Sigma} = 1 - e^{-\dot{W}t}, \qquad (17)$$

как и должно быть: из (14) и (17) следует сохранение полной вероятности.

Из выражения (16) видно, что ширина резонансной линии при $\gamma t \leq 1$ уменьшается по гиперболическому закону, а затем, при $\gamma t \gg 1$, становится постоянной и равной γ . Замена суммирования интегрированием (6) становится корректной при любых временах, если предельная ширина резонансной линии γ превосходит частотный интервал δ_k между соседними уровнями (в окрестности состояния $|k\rangle$):

$$\frac{\pi}{\hbar} \frac{\left|V_{nk}\right|^{2}}{4} \rho\left(E_{k}\right) \ge \frac{1}{\hbar\rho\left(E_{k}\right)}.$$
(18)

Введем безразмерный параметр v, равный отношению частоты Раби Ω_{nk} к частотному интервалу δ_k ,

$$\nu = \frac{\Omega_{nk}}{\delta_k} = \frac{V_{nk}}{\hbar \delta_k} = V_{nk} \rho(E_k).$$
(19)

Область параметров, в которой $v \ge 1$ и, следственно, выполняется неравенство (18), называется областью *квазиконтинуума* энергетического спектра [<u>AK</u>87, сс. 232,138].

[<u>АК</u>87] Акулин В.М., Карлов Н.В.

Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике. М.: Наука, 1987 – 312 с.

В области квазиконтинуума условие применимости ТВ (2.37) нарушается сразу для нескольких конечных состояний в окрестности резонанса; число таких резонансных состояний $N_r \sim v$. Во-вторых, в этой области ширина полосы заселенных возмущением состояний (γ) превосходит расстояние между соседними уровнями (δ_k), т.е. число заселенных состояний N_p велико:

$$N_{p} \sim \hbar \gamma \rho(E_{k}) \sim \left| V_{nk} \right|^{2} \rho^{2}(E_{k}) \sim \nu^{2} \ge 1$$
(20)

В-третьих, число заселенных конечных состояний $N_p \sim v^2$ существенно превосходит число состояний, находящихся в резонансе, $N_r \sim v$. Наконец и в-четвертых, произведение скорости перехода на время Гейзенберга (12) значительно превосходит единицу, $\dot{W}\tau_H = 2\pi |V_{nk}|^2 \rho^2 (E_k) =$ $= 2\pi v^2 \gg 1$, т.е. к наступлению времени Гейзенберга в области квазиконтинуума начальное состояние будет почти полностью истощено.

§ 3.4 Переходы в непрерывный спектр

◆ Для вычисления скорости перехода в непрерывный спектр конечные состояния удобно описывать как собственные функции свободной частицы в кубе с большим ребром *L*, подчиненные условиям периодичности на гранях куба – или как асимптотически близкие к таким ВФ:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp i\vec{k}\vec{r},$$
(21)

где \vec{k} - волновой вектор. Для частиц конечной массы (электронов) с законом дисперсии $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ энергетическая плотность таких состояний для частиц, направление волнового вектора которых лежит внутри телесного угла $d\Omega$, равна

$$\rho(E_k)d\Omega_k = L^3 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d}{dE} \left[\frac{4\pi}{3} (2mE)^{3/2}\right] \frac{d\Omega_k}{4\pi} = L^3 \frac{\sqrt{2E}}{(2\pi)^3} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} d\Omega_k$$
(22)

Матричные элементы перехода из состояния дискретного спектра ψ_n в состояние непрерывного спектра $\psi_{\vec{k}}$ (21)

$$V_{nk} = \int \Psi_n \hat{V} \Psi_k d\vec{r} = \frac{V_{nk}^0}{\sqrt{L^3}}$$
(23)

зависят от размеров куба периодичности, но полная скорость переходов, определяемая золотым правилом Ферми (8), от L не зависит и является физически осмысленной величиной. По этой причине в расчетах часто полагают L = 1 (что, впрочем, не всегда удобно, так как размерность ВФ и матричных элементов помнит о кубе периодичности).

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #04 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ – 3 ИОНИЗАЦИЯ ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ - 2

Выражение для скорости перехода из состояния дискретного спектра во все состояния непрерывного спектра (или в область таких состояний, захватывающих конечную часть энергетической поверхности) дается золотым правилом Ферми

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{n\vec{k}} \right|^2 \rho(E_k)$$
(3.8)

Приведем примеры его использования.

§ 4.1 Однофотонная ионизация атома водорода

• В качестве примера рассмотрим задачу об однофотонной ионизации атома водорода, находящегося в основном состоянии. В дипольном приближении оператор возмущения возьмем в виде резонансной (отрицательно частотной) части первого слагаемого *pA*-формы (см. ф-лу (2.13)):

$$\hat{V}(t) = \frac{e\vec{E}}{m\omega}\,\hat{\vec{p}}\sin\omega t \approx \frac{e\vec{E}}{2m\omega}\,\hat{\vec{p}}e^{-i\omega t}.$$
(1)

Вычисления удобно вести в атомной системе единиц. ВФ начального – основного, 1*s* - состояния в атомной системе единиц есть

$$\varphi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}.$$
 (2)

Конечное состояние опишем с помощью ВФ свободной частицы:

$$\varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}.$$
(3)

★ В кулоновском поле это *борновское приближение* (3) применимо, если скорость электрона v в конечном состоянии удовлетворяет неравенствам $\alpha c \ll v \ll c$ [ЛЛІІІ, §45] и, следовательно, $k \gg 1$. В этой области можно пренебречь энергией связи в сравнении с энергией фотона и считать энергию конечного состояния равной энергии фотона: $E_k = k^2/2 \approx \omega$.

Матричный элемент возмущения (где ψ - угол между направлениями \vec{E} и \vec{k})

$$V_{nk} = \frac{\mathcal{E}k}{2\sqrt{\pi\omega}} \cos\psi \int d\vec{r} e^{i\vec{k}\vec{r}-r}$$
(4)

при больших k имеет асимптотику

$$V_{nk} \approx 4\sqrt{\pi} \frac{\mathcal{E}}{\omega k^3} \cos \psi \,. \tag{5}$$

Подстановка этого выражения и формулы для плотности состояний (3.22)

$$\rho(E_k)d\Omega_k = L^3 \frac{\sqrt{2E}}{(2\pi)^3} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} d\Omega_k \qquad (3.22)$$

в золотое правило Ферми (3.8) дает

$$\dot{W} = 2\pi \left(16\pi \frac{\mathcal{E}^2}{\omega^2 k^6} \cos^2 \psi \right) \frac{\sqrt{2E_k}}{8\pi^3} d\Omega.$$
 (6)

Полная скорость перехода определяется интегрированием по всем углам. Она равна (в обычных единицах)

$$\dot{W} = \frac{2\sqrt{2}}{3}\omega_0 \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_a}\right)^2 \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{9/2} \sim \omega_0 \xi^2 \eta^{-9/2}.$$
(7)

• Для процессов, скорость которых \dot{W} при действии поля излучения пропорциональна его интенсивности, наряду с \dot{W} принято вводить *сечение процесса* - отношение скорости перехода к плотности потока фотонов падающего излучения:

$$\sigma = \frac{\dot{W}}{J} = \frac{8\pi\hbar\omega}{c\mathcal{E}^2}\dot{W}.$$
(8)

Сечение однофотонной ионизации атома водорода при $\eta \gg 1$ имеет вид

$$\sigma_i(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3} \alpha a_0^2 \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{7/2} \sim \alpha a_0^2 \eta^{-7/2} \quad . \tag{9}$$

★ Более точный расчет, использующий в качестве $\varphi_k(\vec{r})$ не плоские волны, а точные ВФ состояний непрерывного спектра в кулоновском поле [ЛЛІV, §56], добавляет к выражению (9) множитель

$$F(\omega) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^{1/2} \frac{\exp(-4\vartheta \operatorname{arcctg}\vartheta)}{1 - \exp(-2\pi\vartheta)}$$
(10)

где

$$\vartheta = \left(2\omega/\omega_a - 1\right)^{-1/2}.$$
(11)

При стремлении ω к красной границе фотоэффекта ($\omega \rightarrow \omega_a/2$) сечение однофотонной ионизации атома водорода стремится к конечному пределу

$$\sigma_i(\omega_a/2) = \frac{512\pi^2}{3} \exp(-4) \cdot \alpha a_0^2 = 30.85 \,\alpha a_0^2 = 6.3 \cdot 10^{-18} \, cm^2.$$
(12)

Конечность сечения ионизации на пороге специфична для кулоновского поля и связана с тем, что граница дискретного спектра для него не является физически выделенной точкой (почему?).

☆ Вычислить время прыжка τ_J (3.11) для условий рассмотренной задачи.

§ 4.2 Однофотонная ионизация слабо связанной системы

◆ Другой удобной моделью квантовой радиофизики является модель *потенциала нулевого радиуса (ПНР)*, в которой ВФ единственного связанного состояния имеет вид

$$\varphi_n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \qquad (13)$$

где $\kappa = \sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$, а $|E_0|$ есть энергия связи. С формальной точки зрения можно считать, что потенциал такой системы задан граничным условием на ВФ

$$\frac{d\ln(r\varphi_n)}{dr}\Big|_{r\to 0} = -\kappa.$$
(14)

Модель ПНР есть трехмерный аналог одномерной модели δ - ямы. Ее можно применять, например, для описания фотоотрыва электрона от отрицательного иона водорода H_1^- ($|E_0| = 0.75 \ \beta B$) или фоторасщепления дейтрона ($|E_0| = 2.22 \ M \beta B$). Слабость потенциала позволяет заменять ВФ конечного состояния плоской волной $\varphi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ при любых E_k .

Используя оператор возмущения в форме (1), для матричного элемента перехода получаем

$$V_{nk} = \frac{e\mathcal{E}\hbar k}{2m\omega} \cos\psi \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \int \frac{e^{-\kappa r + i\vec{k}\vec{r}}}{r} d\vec{r}$$
(15)

Входящий в (15) интеграл *J* вычисляется элементарно:

$$J = \frac{4\pi}{\kappa^2 + k^2}.\tag{16}$$

В итоге интегрирования по углам для скорости перехода получаем

$$\dot{W} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m \hbar \omega^2} \frac{\kappa k^3}{\left(\kappa^2 + k^2\right)^2}.$$
(17)

Для полного сечения ионизации (ср. (8)) получаем

$$\sigma_I = \frac{16\pi}{3} \frac{e^2}{mc\omega} \frac{\kappa k^3}{\left(\kappa^2 + k^2\right)^2}.$$
(18)

Введем безразмерную переменную $\varepsilon = \hbar \omega / |E_0|$, равную отношению энергии фотона излучения к энергии связи. Тогда (18) можно переписать в виде

$$\sigma_I = \frac{32\pi}{3} \alpha \kappa^{-2} \frac{\left(\varepsilon - 1\right)^{3/2}}{\varepsilon^3}.$$
 (19)

Величина κ^{-1} есть радиус локализации системы в основном состоянии = эффективный поперечник системы.



Зависимость сечения ионизации слабо связанной системы от отношения энергии фотона к энергии связи.

Максимум сечения достигается при $\varepsilon = 2$ и равен $(4\pi/3)\alpha\kappa^{-2}$.

★ Формула (19) дает хорошее согласие с экспериментальными значениями сечения фотоотрыва электрона от отрицательного иона водорода [SB59], будучи умноженной на 3.0.

[SB59] S.J. Smith, D.S. Birch

Photodetachment cross section of the negative hydrogen ion Phys. Rev. Lett., 1959, vol. 2, no. 4, pp. 165 – 166.

★ При использовании (19) для описания фоторасщепления дейтрона надо в качестве *m* взять приведенную массу частицы ≈ $m_n/2$, а заряд частицы взять равным e/2.

При этом формула (19) даст хорошее согласие с экспериментальными данными [<u>M</u>67, <u>К</u>07], **будучи умноженной на 1.5 – 1.7.**

□ [<u>M</u>67] В.В. Маляров

Основы теории атомного ядра.

- М.: Наука, 1967. с.435
- [<u>К</u>07] И.М. Капитонов.

Слайды к лекциям "Взаимодействие электронов и фотонов с атомными ядрами" http://nuclphys.sinp.msu.ru/el/lec/el22.htm

Объединяя (9) и (19), резюмируем:

Типичная (максимальная) величина сечения однофотонной ионизации порядка $\sigma_I \sim \alpha a^2$, где *a* - поперечник системы.

§ 4.3 Переходы в шумовом поле

• До сих пор мы пользовались моделью монохроматического внешнего поля, $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t$. В ряде случаев необходим учет флуктуаций внешнего поля излучения, делающих его спектр непрерывным. Обычной моделью шумового поля служит *стационарный случайный процесс* [<u>АДЧ</u>81, с.38].

[<u>АДЧ</u>81] - С.А. Ахманов, Ю.Е Дьяков, А.С. Чиркин Введение в статистическую радиофизику и оптику. М.: Наука, 1981. - 640 с.

Запишем возмущение в виде $\hat{V}(t) = \hat{V}\xi(t)$, где безразмерная случайная функция $\xi(t)$ нормирована условием $\langle \xi^2(t) \rangle = 1$; предположим также, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$. Здесь и в дальнейшем угловые скобки означают усреднение по реализациям. Скорость перехода в данной реализации дается выражением

$$\dot{W}_{k} = \frac{\left|V_{nk}\right|^{2}}{\hbar^{2}} \left[\xi(t)e^{i\omega_{kn}t}\int_{-\infty}^{t}\xi^{*}(t')e^{-i\omega_{kn}t'}dt' + \kappa.c.\right].$$
 (20)

Усредняя это выражение по реализациям с использованием определения корреляционной функции,

$$B(\tau) = \left\langle \xi(t)\xi^*(t-\tau) \right\rangle, \tag{21}$$

получаем

$$\left\langle \dot{W}_{k} \right\rangle = \frac{\left| V_{nk} \right|^{2}}{\hbar^{2}} \int_{-\infty}^{\infty} B(\tau) e^{i\omega_{kn}\tau} d\tau.$$
 (22)

Используя связь между корреляционной функцией и спектральной плотностью (*теорема Винера - Хинчина*, [<u>АДЧ</u>81, с.44]),

$$B(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) \ e^{i\omega\tau} \ d\omega, \qquad (23)$$

представим ответ в виде

$$\left\langle \dot{W}_{k}\right\rangle =\frac{2\pi}{\hbar^{2}}\left|V_{nk}\right|^{2}S\left(-\omega_{kn}\right)$$
(24)

Соотношение (24) также называется золотым правилом Ферми.

★ Примером стационарного шумового поля является тепловое излучение внешнего источника. Форма спектра теплового излучения в модели абсолютно черного тела описывается функцией

$$S_T(\omega) = \frac{15}{2\pi^4} \cdot \frac{\omega^3}{\omega_T^4} \left(e^{\omega/\omega_T} - 1 \right)^{-1}, \qquad (25)$$

где $\omega_T = kT/\hbar$, а *T* есть температура источника. Солнечному свету соответствуют интенсивность $I_{\circ} = 0.135 \ Bm \ cm^{-2}$ и характерная частота $\omega_{T^{\circ}} = 7.6 \cdot 10^{14} \ c^{-1}$, что дает значения матричного элемента $V_{nk} = ea_0 \sqrt{8\pi I_{\circ}/c} = 8.53 \cdot 10^{-20} \ \text{эрг}$ и спектральной плотности на стандартной частоте $S_{T^{\circ}}(\omega_s) = 1.38 \cdot 10^{-16} \ c$. В итоге для средней скорости перехода имеем оценку $\langle \dot{W} \rangle = 5.7 \ c^{-1}$.

• Формулы (3.8) и (24) служат источником еще одной формы выражения для скорости перехода, часто встречающейся в литературе,

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{nk} \right|^2 \delta \left(E_n + \hbar \omega - E_k \right), \tag{26}$$

которую также принято называть золотым правилом Ферми. Правая часть выражения (26) равна либо нулю, либо бесконечности, и не может быть непосредственно соотнесена с результатами измерений. При умножении (26) на плотность состояний $\rho(E)$ и интегрировании по dE из нее получаются формула (3.8), а при умножении (26) на спектральную плотность шумового излучения $S(\omega)$ и интегрировании по $d\omega$ из нее получается формула (24).

Выражение (26) полезно тем, что подчеркивает симметрию случаев «непрерывный частотный спектр системы + дискретный спектр поля» и «дискретный частотный спектр системы + непрерывный спектр поля», и тем, что подчеркивает заложенное в первый порядок теории возмущений представление о резонансном характере переходов.

§ 4.4 Переходы в поле с квазинепрерывным спектром

◆ Модель шумового поля может быть применена и в том случае, когда спектр излучения является *квазинепрерывным*. Таким спектром обладает *многомодовая модель* случайного процесса [<u>АДЧ</u>81, с. 199-214], описывающая суперпозицию гармонических колебаний (мод), амплитуды и фазы которых случайны:

$$\xi(t) = \sum_{n=1}^{N} a_n \cos(\omega_n t + \varphi_n).$$
(27)

В простейшей версии считают, что все амплитуды мод одинаковы, $(a_n \equiv a)$, частоты мод эквидистантны $(\omega_n = \omega_0 + n\delta)$, а фазы φ_n равномерно распределены на интервале $[0, 2\pi]$. • Введем среднюю величину напряженности поля как ее среднеквадратичное значение, $\overline{\mathcal{E}} = \sqrt{\langle \mathcal{E}^2 \rangle}$; среднюю частоту Раби определим формулой $\overline{\Omega} = d\overline{\mathcal{E}}/\hbar$. Для того, чтобы частотный спектр поля можно было считать непрерывным, должно быть выполнено условие возникновения квазиконтинуума: частота Раби для **одной моды** поля должна быть много больше спектрального расстояния между модами,

$$\Omega_1 = \overline{\Omega} \sqrt{\frac{2}{N}} >> \delta.$$
(28)

При этом скорость перехода может быть описана формулой (24)

$$\left\langle \dot{W}_{nk} \right\rangle = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| V_{nk} \right|^2 S(-\omega_{kn}) \tag{24}$$

где эффективная спектральная интенсивность есть

$$S(-\omega_{kn}) \approx \frac{1}{N\delta}.$$
 (30)

Подразумевается, что частота перехода ω_{kn} лежит внутри полосы спектра многомодового излучения.

★ Пример. Пусть рабочий переход лазера имеет ширину линии (полосы) $\Delta \omega = 1 \ cm^{-1} = 1.88 \cdot 10^{11} \ c^{-1}$. Положим, что генерация идет на всех продольных модах резонатора длиной $L = 50 \ cm$ с частотами, лежащими в полосе рабочего перехода. Тогда спектральное расстояние между модами $\delta = \pi c/L = 10^{-2} \ cm^{-1} = 1.88 \cdot 10^9 \ c^{-1}$ и N = 100. Квазиконтинуум возникнет при условии

$$\overline{\mathcal{E}} >> \frac{\hbar\delta}{d_s} \sqrt{\frac{N}{2}} \equiv \mathcal{E}_{qc}.$$
(31)

Для условий нашего примера $\mathscr{E}_{qc} = 5.5 \ \Gamma c$, что соответствует интенсивности излучения $I_{qc} = 7.2 \cdot 10^3 \ Bm \ cm^{-2}$. Скорость перехода $\langle \dot{W} \rangle$ оказывается много больше спектрального расстояния между модами: $\langle \dot{W} \rangle >> \langle \dot{W} \rangle_{ac} \approx 2\pi \delta$.

 \Rightarrow При заданных значениях средней частоты Раби $\overline{\Omega}$ и межмодовом расстоянии б найти область значений числа мод *N*, допускающих применение формулы (24).

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #05 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 4 ЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ

TEST 02

§ 5.1 Линейная поляризуемость

• По определению, средний дипольный момент $\langle \vec{d}(t) \rangle \equiv \vec{d}(t)$ (для удобства письма опускаем угловые скобки и знак оператора) квантовой системы в состоянии $|\Psi\rangle$ есть

$$\vec{d}(t) = \langle \Psi(t) | e \hat{\vec{r}} | \Psi(t) \rangle.$$
(1)

Далее будем называть $\vec{d}(t)$ просто *дипольным моментом*. Рассмотрим поведение дипольного момента системы с дискретным спектром, находящейся под действием адиабатически включаемого гармонического возмущения $\hat{V}_0(t) = -e\vec{r}\vec{E}\cos\omega t$. Если $|n\rangle$ - начальное (невозмущенное) стационарное состояние системы, то в первом порядке теории возмущений дипольный момент дается выражением

$$\vec{d}(t) = \int \left(\varphi_n^*(\vec{r}) e^{i\omega_n t} + \sum_k a_k^*(t) \varphi_k^*(\vec{r}) e^{i\omega_k t} \right) (e\vec{r}) \left(\varphi_n(\vec{r}) e^{-i\omega_n t} + \sum_k a_k(t) \varphi_k(\vec{r}) e^{-i\omega_k t} \right) d\vec{r}$$

где амплитуды $a_k(t)$ определяются формулой первого порядка теории возмущений. Будем считать, что состояния $|n\rangle$ и $|k\rangle$ дискретного спектра обладают определенной четностью. Тогда

$$\vec{d}(t) = \sum_{k} \left[\vec{d}_{nk} e^{i\omega_{nk}t} a_{k}(t) + \vec{d}_{kn} e^{i\omega_{kn}t} a_{k}^{*}(t) \right].$$
(2)

Подставляя в это выражение значения амплитуд (см. формулу 2.33),

$$a_{k}(t) = -\frac{V_{kn}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t}}{\omega_{kn} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t}}{\omega_{kn} - \omega} \right],$$
(3)

приходим к формуле

$$\vec{d}(t) = \cos\omega t \sum_{k} \left[\frac{\vec{d}_{nk} V_{kn}}{\hbar} \left(\frac{1}{\omega_{nk} + \omega} + \frac{1}{\omega_{nk} - \omega} \right) \right].$$
(4)

В первом порядке теории возмущений дипольный момент системы пропорционален величине возмущения и зависит от времени гармонически, с частотой поля.

• Определим *тензор линейной поляризуемости* системы *S* соотношением $d_{\alpha} = \chi_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\beta}$ (подразумевается суммирование по повторяющимся индексам). Из вида оператора возмущения $\hat{V}_0(t) = -e\vec{r}\vec{E}\cos\omega t$ и формулы (4) получается выражение

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn}(r_{\alpha})_{nk}(r_{\beta})_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}$$
(5)

В дальнейшем, когда речь пойдет об оценках, мы будем называть поляризуемостью и отдельную компоненту тензора, положив условно $\chi = \chi_{xx}$. Итак,

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} x_{nk}^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}$$
(6)

Вблизи резонансов линейная поляризуемость неограниченно возрастает. Это возрастание имеет фантомный характер, поскольку предпосылкой вывода формулы (6) является применимость первого порядка теории возмущений для расчета амплитуд (см. (2.37)).

• Оценим величину поляризуемости вдали от резонансов, на низких частотах: $\chi(\omega) \approx \chi(0)$.

① Стандартная оценка. Для атома в основном состоянии можно принять $x_{nk} \sim a_0$, $\omega_{nk} \sim \omega_a$ и $\chi(0) \sim e^2 a_0^2 / \hbar \omega_a \sim a_0^3$, что согласуется с предварительной оценкой в примере 1 §1.3.

2 Квазивырождение сильно увеличивает восприимчивость. Если по каким-либо причинам в спектре имеется уровень, близкий к начальному, $\omega_{nk} \ll \omega_a$, то может оказаться, что $\chi(0) \gg a_0^3$ (много больше геометрической оценки).

★ Пример. Из-за взаимодействия атома с вакуумом электромагнитного поля уровни дискретного спектра сдвигаются по отношению к положениям, найденным в модели атома, описываемой уравнением Дирака (*лэмбовский сдвиг*). Лэмбовский сдвиг приводит к расщеплению уровней $2p_{1/2}$ и $2s_{1/2}$ у атома водорода: частота перехода между ними $\omega_{2sp} \approx 6.6 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1} \approx 0.41 \alpha^3 \omega_a$. Статическая поляризуемость атома в состоянии $2p_{1/2}$ имеет величину $\chi(0) = 1.13 \cdot 10^8 a_0^3$.

🖈 Может ли статическая поляризуемость атома χ(0) быть отрицательной?

☆ Определить зависимость статической поляризуемости системы с квазивырождением от амплитуды поля.

③ Квазиклассическая область. Оценим статическую поляризуемость атома в ридберговском состоянии с квантовым числом $n \gg 1$. В области больших $n x_{nk} \sim a_0 n^2$, $\omega_{nk} \sim \omega_a n^{-3}$. Типичное слагаемое в сумме

'10

$$\chi(0) \sim \frac{d}{dn} a_0^3 n^7 \sim a_0^3 n^6, \tag{7}$$

что в общем согласуется с наивной геометрической оценкой §1.3 (пример 3).

• Мы исследовали зависимость χ от матричных элементов длины и собственных элементов частот. Рассмотрим зависимость от частоты поля для двух одномерных систем в возбужденных состояниях (n = 2).

Ф. Для гармонического осциллятора с уровня n = 2 разрешены переходы только на уровни n = 1 и n = 3. Частота перехода равна частоте колебаний осциллятора Ω , откуда

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{2\Omega}{\Omega^2 - \omega^2} \left(x_{23}^2 - x_{21}^2 \right).$$
 (8)

Матричные элементы удобно вычислять с помощью операторов рождения и уничтожения:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}} \left(\frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}} \right), \tag{9}$$

откуда

$$x_{23} = L \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}, \quad x_{21} = L \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}},$$
 (10)

И

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{2\Omega}{\Omega^2 - \omega^2} \cdot \frac{\hbar}{m\Omega} \left(\frac{3}{2} - \frac{2}{2}\right) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\Omega^2 - \omega^2}, \quad (11)$$

что в точности совпадает с классическим выражением. Результат не зависит от того, в каком состоянии находится осциллятор: все равно в ответ войдет разность квадратов матричных элементов, пропорциональных $\sqrt{n+1}$ и \sqrt{n} .



2. Для частицы в прямоугольном ящике спектр энергий имеет вид

$$E_n = \hbar \Omega n^2, \quad \hbar \Omega = \frac{\pi^2}{8} \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$
 (12)

Низкочастотные резонансы соответствуют переходам $2 \rightarrow 1$ ($\Omega_{21} = -3\Omega$) и $2 \rightarrow 3$ ($\Omega_{23} = 5\Omega$). Ограничимся этими членами:

$$\chi(\omega) \approx \frac{-3\Omega x_{21}^2}{9\Omega^2 - \omega^2} + \frac{5\Omega x_{23}^2}{25\Omega^2 - \omega^2}.$$
 (13)

Матричные элементы можно определить численно: $x_{21} = 1.132a$, $x_{32} = 1.222a$. График представляет собой суперпозицию двух поверну-тых по-разному гипербол:



• Наряду с поляризуемостью (коэффициентом пропорциональности между дипольным моментом и амплитудой электрического поля) в теоретической физике рассматривают [ЛЛV, §123] (обобщенную) восприимчивость $\alpha(\omega)$, определенную соотношением $\alpha(\omega) = e^{-2}\chi(\omega)$ и представляющую коэффициент пропорциональности между фурьекомпонентами смещения и силы. Размерность восприимчивости [α] = $M^{-1}T^2$.

§ 5.2 Высокочастотное разложение линейной поляризуемости

• В области высоких частот, $\omega \rightarrow \infty$, полученное в предыдущем параграфе выражение для поляризуемости

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} x_{nk}^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}$$
(14)

можно представить в виде формального разложения по степеням ω^{-2} :

$$\chi(\omega) = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} x_{nk}^2}{\omega^2 \left(1 - \frac{\omega_{kn}^2}{\omega^2}\right)} = -\frac{1}{\omega^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A_m}{\omega^{2m}} , \qquad (15)$$

где

$$A_{m} = \frac{e^{2}}{\hbar} \sum_{k} 2x_{nk}^{2} \omega_{kn}^{2m+1}.$$
 (16)

Коэффициенты A_m могут быть записаны в форме средних значений некоторых операторов по начальному состоянию $|n\rangle$. Это позволяет приближенно вычислять поляризуемость $\chi(\omega)$ без предварительного определения всех частот переходов ω_{kn} и матричных элементов x_{kn} .

• Основой преобразований является связь между матричными элементами **произвольного** оператора \hat{Z} и его производной по времени $\dot{\hat{Z}}$ между стационарными состояниями системы с гамильтонианом \hat{H} . Из уравнения Гейзенберга

$$\dot{\hat{Z}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{Z}, \hat{H}]$$
(17)

получаем

$$\left(\dot{Z}\right)_{nk} = i\omega_{nk} Z_{nk}.$$
 (18)

• Отметим полезный частный случай этого соотношения. Для систем с гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}) \tag{19}$$

для оператора координаты \hat{x} получаем

$$\dot{\hat{x}} = -\frac{i}{\hbar} \Big[\hat{x}, \hat{H} \Big] = -\frac{i}{\hbar} \Big[\hat{x}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \Big] = \frac{\hat{p}}{m},$$
(20)

откуда получается соотношение между матричными элементами операторов координаты и соответствующей компоненты импульса:

$$p_{nk} = im\omega_{nk} x_{nk}. (21)$$

Матричный элемент оператора импульса пропорционален произведению частоты перехода на матричный элемент оператора координаты.

EOL 💿
ЛЕКЦИЯ #06 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 5 ЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ – 2

§ 6.1 Высокочастотное разложение линейной поляризуемости (продолжение)

• Продолжим преобразование высокочастотного разложения линейной поляризуемости

$$\chi(\omega) = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} |x_{nk}|^2}{\omega^2 \left(1 - \frac{\omega_{kn}^2}{\omega^2}\right)} = -\frac{1}{\omega^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{A_m}{\omega^{2m}}, \quad (5.15)$$

где

$$A_{m} = \frac{e^{2}}{\hbar} \sum_{k} 2|x_{nk}|^{2} \omega_{kn}^{2m+1}, \qquad (5.16)$$

с помощью соотношения

$$\left(\dot{Z}\right)_{nk} = i\omega_{nk}Z_{nk}.$$
(5.18)

Используя очевидное соотношение $\omega_{nk} = -\omega_{kn}$, коэффициенты разложения (5.16) можем записать в виде

$$A_{m} = \frac{e^{2}}{\hbar} \sum_{k} \left\{ \left(x_{nk} \omega_{nk}^{m} \right) \left(x_{kn} \omega_{kn}^{m+1} \right) \left(-1 \right)^{m} - \left(x_{nk} \omega_{nk}^{m+1} \right) \left(x_{kn} \omega_{kn}^{m} \right) \left(-1 \right)^{m} \right\} = \\ = \frac{e^{2}}{\hbar} \sum_{k} \left\{ \frac{\left(x_{nk} \omega_{nk}^{m} i^{m} \right) \left(x_{kn} \omega_{kn}^{m+1} i^{m+1} \right) \left(-1 \right)^{m} \left(i \right)^{-2m-1} - \right\} \\ \left\{ \left(x_{nk} \omega_{nk}^{m+1} i^{m+1} \right) \left(x_{kn} \omega_{kn}^{m} i^{m} \right) \left(-1 \right)^{m} \left(i \right)^{-2m-1} \right\}$$

$$= -i \frac{e^{2}}{\hbar} \left\langle n \right| \left[\frac{d^{m} \hat{x}}{dt^{m}}, \frac{d^{m+1} \hat{x}}{dt^{m+1}} \right] \left| n \right\rangle.$$
(1)

Коэффициент A_m в высокочастотном разложении поляризуемости пропорционален среднему (по состоянию $|n\rangle$) значению коммутатора m-й и (m+1)-й производных по времени от невозмущенного оператора координаты.

• Пусть гамильтониан невозмущенной системы имеет вид

$$\hat{H}_{0} = \frac{\vec{p}^{2}}{2m} + U(\hat{\vec{r}}).$$
(2)

Найдем коэффициент A₀. Из гейзенберговского уравнения движения (5.17) получаем (ср. (5.20))

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m},\tag{3}$$

(что согласуется с классическим определением импульса), и

$$A_0 = -i\frac{e^2}{\hbar m} \langle n | [\hat{x}, \hat{p}_x] | n \rangle = \frac{e^2}{m}.$$
 (4)

Значение A_0 универсально - не зависит от вида потенциала $U(\hat{r})$. Главный член в высокочастотной асимптотике поляризуемости любых систем одинаков.

★ Безразмерная величина $f_{kn}^x = 2m\hbar^{-1}x_{kn}^2\omega_{kn}$ называется *силой осциллятора* перехода $n \to k$. Равенство $A_0 = e^2m^{-1}\sum_{k} f_{kn}^x$ приводит к соотношению

$$\sum_{k} f_{kn}^{x} = 1, \tag{5}$$

....

которое известно как *правило сумм* или как *теорема Томаса – Райхе - Куна* о суммах сил осцилляторов.

 \Rightarrow Может ли сила осциллятора f_{kn}^x для некоторого перехода превосходить 1?

◆ Найдем коэффициент *A*₁. Из гейзенберговского уравнения движения (5.17) следует равенство

$$\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}_x}{m}, U(\hat{\vec{r}}) \right] = -\frac{1}{m} \cdot \frac{\partial U(\hat{\vec{r}})}{\partial x}, \tag{6}$$

повторяющее второй закон Ньютона. Из (1) находим

$$A_{1} = -i\frac{e^{2}}{m^{2}\hbar} \langle n | \left[\hat{p}_{x}, \frac{\partial U(\hat{r})}{\partial x} \right] | n \rangle = -\frac{e^{2}}{m^{2}} \left\langle \frac{\partial^{2} U(\hat{r})}{\partial x^{2}} \right\rangle.$$
(7)

Величина A_1 пропорциональна среднему значению "кривизны" потенциала $\langle U_{xx} \rangle$ в начальном состоянии.

 \Rightarrow Может ли при финитном движении величина $\langle U_{xx} \rangle$ стать отрицательной?

☆ Вычислить коэффициент A_2 .

 \approx Выше мы исследовали диагональную компоненту тензора поляризуемости $\chi \equiv \chi_{xx}$. Найти коэффициенты A_0 и A_1 для недиагональной компоненты тензора χ_{yx} .

★ Аналогичным способом можно вычислять суммы с четными степенями частот

$$B_m = \sum_{k} |x_{nk}|^2 \,\omega_{kn}^{2m} \,. \tag{8}$$

L06

'10

Например,

$$B_{1} = \sum_{k} |x_{nk}|^{2} \omega_{kn}^{2} = \frac{1}{m^{2}} \langle n | p_{x}^{2} | n \rangle$$
(9)

☆ Вычислить сумму B_2 .

§ 6.2 Классический предел поляризуемости

• Коэффициенты A_0 и A_1 высокочастотного разложения поляризуемости (см. выражения (4) и (7)) не содержат постоянной Планка \hbar и имеют конечный классический предел. Это позволяет предположить, что и выражение $\chi(\omega)$ в целом имеет классический предел, несмотря на наличие множителя \hbar^{-1} в его определении.

• Рассмотрим классический предел поляризуемости для одномерной нелинейной системы - модели, описывающей частицу массы m в потенциале глубины U_0 и ширины a. Примем m, U_0 и a за масштабы; тогда \hbar станет безразмерным параметром, численное значение которого равно

$$"\hbar" = \frac{\hbar}{\sqrt{mU_0 a^2}}.$$
 (10)

Определим классический предельный переход так: $\hbar \to 0$ при условии, что начальный уровень дискретного спектра сохраняет неизменную энергию $E_n = E$. В квазиклассической области $\hbar \ll 1$ частоты переходов и матричные элементы могут быть выражены через характеристики классического закона движения. Одномерное финитное движение почти при всех начальных условиях является периодическим и может быть записано в виде ряда Фурье:

$$x(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} X_k(E) e^{ik\Omega(E)t},$$
(11)

где $\Omega(E)$ - частота классического движения, X_k - фурье-амплитуда k-й гармоники закона движения.

При $\hbar \ll 1$ частота перехода $\omega_{n+p,n}$ приближенно равна p -кратной частоте классического движения при средней энергии перехода $\overline{E} = (E_n + E_{n+p})/2$,

$$\omega_{n+p,n} = p\Omega(\overline{E}) = p\Omega + \hbar \frac{p^2}{2} \Omega \frac{d\Omega}{dE}.$$
 (12)

При $\hbar \ll 1$ матричный элемент координаты $x_{n,n+p}$ приближенно равен фурье-амплитуде p-й гармоники классического движения при средней энергии перехода:

$$x_{n,n+p} = X_p(\overline{E}) = X_p + \hbar \frac{p}{2} \Omega \frac{dX_p}{dE}.$$
 (13)

Формулы (12) и (13) составляют утверждения основных теорем соответствия квантовой механики (их также называют *принципом соответствия*). Они могут быть отчасти обоснованы с помощью метода ВКБ.

☆ Доказать равенство (12) в **нулевом** прядке по *ћ*, исходя из правила квантования Бора - Зоммерфельда:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E_n - U(x)]} \, dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right),\tag{14}$$

где x_1, x_2 - точки поворота (корни уравнения E = U(x)).

☆ Используя результат предыдущей задачи, доказать равенство (12) с точностью до **первого** порядка по \hbar , исходя из соотношений симметрии, $\omega_{nk} = -\omega_{kn}$, и транзитивности, $\omega_{nm} + \omega_{mk} = \omega_{nk}$, для квантовых частот переходов.

☆ Схема вывода равенства (13) в **нулевом** порядке по *ћ* приведена в [<u>М</u>75, с.134].

(<u>М</u>75] - Мигдал А.Б.

Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975. - 335 с.

Подставим выражения (12) и (13) в формулу

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} x_{nk}^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}$$
(5.6)

и разложим каждый член суммы по степеням \hbar . При суммировании по k члены, пропорциональные \hbar^0 , тождественно сокращаются, а члены, пропорциональные \hbar^1 , определяют классический предел поляризуемости:

$$\chi_{c}(\omega) = e^{2} \sum_{p} \Omega \frac{d}{dE} \left(\frac{p^{2} X_{p}^{2} \Omega}{p^{2} \Omega^{2} - \omega^{2}} \right) .$$
(15)

У квантовой системы восприимчивость на резонансных частотах имеет полюсы первого порядка. Если система неизохронна, $d\Omega/dE \neq 0$, то классическая восприимчивость на резонансных частотах имеет полюсы второго порядка.

Отсутствие *ћ* в выражении еще не делает его правильной классической формулой. К счастью, классический расчет поляризуемости одномерной нелинейной системы [<u>ГПЮ</u>67] приводит именно к выражению (15) (см. курс "Теория колебаний II", L10).

[ПЮ67] - Гапонов А.В., Петелин М.И., Юлпатов В.К. Индуцированное излучение возбужденных классических осцилляторов и его использование в высокочастотной электронике. Изв. вузов - Радиофиз. 1967, т.Х, №9-10, с.1414-53 \Rightarrow Вычислить классическую поляризуемость заряженной частицы в (одномерном) потенциальном ящике. Показать, что статическая поляризуемость $\chi(0)$ такой системы всегда отрицательна.

§ 6.3 Мнимая часть поляризуемости и изменение энергии

• При рассмотрении поляризуемости $\chi(\omega)$ как комплексной величины необходимо учесть, что в общей теории комплексная восприимчивость $\alpha(\omega)$ определяется по отклику на силу вида $f(t) = f_0 \exp(-i\omega t) [\underline{\Pi}\underline{\Pi}V,$ §123]. Поэтому вместо ранее применявшегося выражения $d(t) = \chi(\omega) \mathcal{E} \cos \omega t$ следует записать

$$d(t) = \frac{1}{2} \Big[\chi(\omega) \mathcal{E} e^{-i\omega t} + \chi(-\omega) \mathcal{E} e^{i\omega t} \Big].$$
(16)

Для комплексной поляризуемости выполняются соотношения симметрии

$$\chi'(\omega) = \chi'(-\omega), \quad \chi''(-\omega) = -\chi''(\omega). \tag{17}$$

В соответствии с ними можно записать (14) в виде

$$d(t) = \mathscr{E}\left[\chi'(\omega)\cos\omega t + \chi''(\omega)\sin\omega t\right]$$
(18)

Наличие компоненты отклика, сдвинутой по фазе на $\pi/2$ от поля, приводит к тому, что средняя мощность Q работы, совершаемой переменным полем над системой = средняя скорость изменения энергии системы, становится отличной от нуля:

$$Q = \overline{\dot{d}(t)} \mathcal{E} \cos \omega t =$$

$$= -\omega \chi' \mathcal{E}^2 \sin \omega t \cos \omega t + \overline{\omega \chi'' \mathcal{E}^2 \cos \omega t \cos \omega t}$$
(19)

При усреднении по времени первый член обращается в нуль, а второй дает (ср. [ЛЛV, (123.11)]):

$$Q = \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) \mathcal{E}^2$$
 (20)

★ Говоря о знаке мнимой части восприимчивости, подразумевают ее знак при заданном положительном значении частоты. Из-за симметрии $\chi''(-\omega) = -\chi''(\omega)$ скорость изменения энергии не зависит от этой условности. • В модели адиабатического включения поля (см. §2.4, ф-ла (2.31)) частота ω , входящая в f(t) имеет бесконечно малую мнимую добавку. Учитывая тождество

'10

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{x - i\varepsilon} = i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\frac{1}{x},$$
(21)

для мнимой части $\chi''(\omega)$ поляризуемости системы в состоянии $|n\rangle$ получаем выражение

$$\chi''(\omega) = \pi \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} x_{nk}^2 \left[\delta(\omega_{kn} - \omega) - \delta(\omega_{kn} + \omega) \right]$$
(22)

(ср. [<u>ЛЛ</u>V, (124.8)]).

В интерпретации этой формулы следует проявлять осторожность. Формула (20) пригодна для расчетов, если энергия системы за счет работы, совершаемой внешним электрическим полем, изменяется со временем по **линейному** закону = если переходы из начального состояния системы происходят с **постоянной** скоростью = если эволюция системы описывается золотым правилом Ферми.

Однако для системы с дискретным спектром под воздействием гармонического поля постоянство скоростей перехода места не имеет. Поэтому формула (22) не описывает отклик системы с дискретным спектром на гармоническое внешнее поле.

С другой стороны, формулы (20) и (22) позволяют вычислить скорость поглощения энергии системой под действием достаточно слабого шумового поля с непрерывной спектральной плотностью $S(\omega)$ - см. § 4.3:

$$Q = \mathcal{E}^2 \int \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) S(\omega) d\omega.$$
 (23)

• Простейшим примером процесса, в котором слабое гармоническое поле вызывает увеличение энергии системы с постоянной скоростью, является процесс (однофотонной) ионизации (см. § 4.1): если сечение ионизации $\sigma(\omega)$, то скорость перехода

$$\dot{W} = \sigma(\omega)J = \sigma(\omega)\frac{c\mathcal{E}^2}{8\pi\hbar\omega}.$$
 (24)

В каждом акте перехода в непрерывный спектр атомная система поглощает квант: $\Delta E = \hbar \omega$. Поэтому

$$Q = \hbar \omega \dot{W} = \sigma(\omega) \frac{c \mathcal{E}^2}{8\pi}$$
(25)

С другой стороны, скорость поглощения энергии связана с мнимой частью восприимчивости формулой (20). Приравнивая правые части, приходим к соотношению:

$$\chi'' = \sigma \frac{c}{4\pi\omega} = \frac{1}{8\pi^2} \sigma \lambda \,. \tag{26}$$

Мнимая часть восприимчивости в области частот, где возможна однофотонная ионизация, пропорциональна произведению сечения ионизации на длину волны излучения.

• Оценка в буквах:

$$\sigma \sim \alpha a_0^2, \quad \lambda \sim \frac{1}{\alpha} a_0, \quad \chi'' \sim a_0^3 \sim \chi'$$
 (27)

Мы возвращаемся к той же оценке, которую получили ранее для вещественной части поляризуемости, $\chi' \sim a_0^3$ (см. пример 1 в §1.3). Так и должно быть: величины χ' и χ'' связаны соотношениями Крамерса – Кронига

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \qquad \chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (28)$$

и потому должны иметь один порядок величины.

EOL 🖸

TEST 03

§ 7.1 Поглощение при переходах в квазиконтинууме: хаотическая система в гармоническом поле

• Формула

$$Q = \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) \mathcal{E}^2 \tag{6.20}$$

позволяет рассчитать поляризуемость системы с квазинепрерывным спектром в условиях, когда гармоническое внешнее поле достаточно сильно, чтобы возник квазиконтинуум. Пусть $|n\rangle$ - высоковозбужденное состояние такое, что оба резонансных значения энергии $E_{k\pm} = E_n \pm \hbar \omega$ принадлежат области плотного дискретного спектра. Скорость изменения энергии системы может быть записана в виде

$$Q = \hbar \omega \left(\dot{W}_{+} - \dot{W}_{-} \right), \tag{1}$$

где скорости переходов с увеличением (\dot{W}_+) и уменьшением (\dot{W}_-) энергии определяются золотым правилом Ферми (см. §3.2):

$$\dot{W}_{\pm} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4} |x_{nk}|^2 \rho(E_{k\pm}), \qquad (2)$$

где $\rho(E_{k\pm})$ есть плотность уровней системы вблизи конечных состояний. • Если классическое движение системы является хаотическим, то спектральная плотность $S_x(E,\omega)$ координаты x классической системы в состоянии с энергией E будет непрерывной функцией частоты ω (что на спектральном языке отражает наличие перемешивания: см. курс NLD). Квантовым аналогом этой непрерывности является отсутствие правил отбора, облегчающее возникновение квазиконтинуума. Матричные элементы x_{nk} квантовых хаотических систем нерегулярно зависят от индекса k и могут описываться как случайные величины. Входящее в формулы (2) среднее значение квадрата $\overline{|x_{nk}|^2}$ матричных элементов резонансных переходов выражается через классический спектр мощности $S_x(E,\omega)$ так [FP86, W87]:

$$\overline{\left|x_{nk}\right|^{2}} \approx \frac{S_{x}(E,\omega)}{\hbar\rho(E)}$$
(3)

- [FP86] Feingold M., Peres A.
 Distribution of matrix elements of chaotic systems Phys. Rev. A, 1986, vol.34, n. 1, pp. 591-5.
- [W87] Wilkinson M.
 A semiclassical sum rule for matrix elements of classically chaotic systems J. Phys. A Math. Gen. 1987, vol. 20, n. 9, pp. 2415-23.

Для энергии E, входящей в (2), следует брать интерполяционное значение

$$\overline{E}_{\pm} = \frac{E_n \pm E_{k\pm}}{2} = E_n \pm \frac{\hbar\omega}{2} \tag{4}$$

(ср. выбор средней энергии перехода \overline{E} в §6.2). Из формул (1), (2), (3) и (4) получаем:

$$Q = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2 \mathcal{E}^2 \left(\frac{dS_x}{dE} + S_x \frac{d\ln\rho}{dE} \right).$$
(5)

Отсюда с помощью формулы (6.20) находим мнимую часть поляризуемости:

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi \omega e^2}{\rho} \frac{d}{dE} (S_x \rho).$$
(6)

Существенно, что найденная мнимая часть поляризуемости является классической величиной - не содержит постоянной Планка *ћ*.

Действительная часть поляризуемости может быть найдена из (6) с помощью дисперсионного соотношения Крамерса - Кронига,

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathscr{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\widetilde{\omega})}{\widetilde{\omega} - \omega} d\widetilde{\omega}.$$
 (7)

Типичные функции $\chi'(\omega)$ и $\chi''(\omega)$ показаны на следующем рисунке.



Отметим, что определенная формулой (6) мнимая часть восприимчивости может на некоторых частотах принимать отрицательные значения: при определенных условиях энергия системы под действием внешнего гармонического поля может уменьшаться. На приведенном рисунке области отрицательного поглощения расположены при $\omega \approx 1$ и $\omega \approx 2$.

Существование областей отрицательного поглощения может вызвать законные сомнения, так как численное дифференцирование – весьма ненадежная операция. Докажем, однако, что по крайней мере для одного класса хаотических систем – биллиардов (систем, в которых точка свободно движется в двумерной области, ограниченной жесткими стенками, отражаясь от них по закону «угол падения равен углу отражения») отрицательное поглощение имеет место с необходимостью.



Траектория частицы в биллиарде «стадион» (граница – две полуокружности одинакового радиуса, сопряженные отрезками параллельных прямых).

В двумерном случае плотность состояний не зависит от энергии – это есть константа, пропорциональная площади биллиарда:

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{mS}{\hbar^2}.$$
(8)

Тогда формулу для восприимчивости можно переписать в виде

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi \omega e^2}{\rho} \frac{d}{dE} (S_x \rho) = \pi e^2 \omega \frac{dS_x}{dE}.$$
 (9)

Поделим обе части этого выражения на ω и проинтегрируем по частоте:

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\chi''(\omega)}{\omega} d\omega = \frac{\pi}{2} e^2 \frac{d}{dE} \int_{-\infty}^{\infty} S_x(E, \omega) d\omega$$
(10)

(в правом интеграле изменен нижний предел интегрирования – на основе четности функции). Учитывая, что спектр мощности и корреляционная функции связаны фурье-преобразованием, можем записать

$$B_{x}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S_{x}(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega.$$
 (11)

При $\tau = 0$ в правой части (11) стоит нужный нам интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} S_x(\omega) d\omega = B_x(0) = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \Delta x$$
(12)

Он равен дисперсии (активной) координаты. Но при движении в биллиарде форма траектории и все ее геометрические характеристики вовсе не зависят от энергии: $\Delta x = \text{const}$, а потому правая часть равенства (10) обращается в ноль, и мы имеем

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\chi''(\omega)}{\omega} d\omega = 0.$$
 (13)

Такое равенство возможно или при $\chi''(\omega) \equiv 0$, или при существовании областей, где $\chi''(\omega) < 0$.

§ 7.2 Возбуждение колебаний многоатомных молекул

• Применим полученные результаты к описанию возбуждения колебаний многоатомных молекул низкочастотным (инфракрасным) полем, частота которого порядка колебательных частот молекулы. Для Nатомной молекулы число колебательных степеней свободы равно K = 3N - 6. Считая все колебательные частоты одинаковыми, опишем молекулу моделью K-мерного изотропного осциллятора с (колебательной) частотой ω_v . По квазиклассической оценке (формула Вейля, [ЛЛШ, §48]) число состояний $\overline{\mathcal{N}}(E)$ с энергией, не превосходящей E, есть

$$\bar{\mathscr{N}}(E) = \frac{\mathcal{V}(E)}{\left(2\pi\hbar\right)^d},\tag{14}$$

где *d* есть число степеней свободы системы, а V(E) есть фазовый объем, доступный системе при $H(\vec{p}, \vec{q}) \le E$.

Для выбранной модели значение V(*E*) равно объему 2*K*-мерной сферы радиуса $\sqrt{2E/\omega_v}$:

$$\mathbf{V}(E) = \frac{(2\pi)^{K}}{K!} \left(\frac{E}{\omega_{v}}\right)^{K}.$$
(15)

Отсюда для плотности уровней имеем

$$\rho(E) = \frac{1}{E} \left(\frac{E}{\hbar \omega_{\nu}} \right)^{K} \cdot \frac{1}{(K-1)!}.$$
(16)

Типичные значения колебательных частот молекул лежат в диапазоне от $2 \cdot 10^{13} \, c^{-1}$ $2 \cdot 10^{14} \, \mathrm{c}^{-1}$. ДО Для дальнейших оценок примем $\omega_{\tau} = 6.3 \cdot 10^{13} \, \mathrm{c}^{-1}$. Рассмотрим систему в состоянии с энергией $E = \hbar \omega_s = 1.16$ эВ (примерно вдвое меньшей энергии диссоциации молекулы) и найдем условия возникновения квазиконтинуума в окрестности этого состояния. Эффективное колебательное квантовое число $n_{v} = E/\hbar\omega_{v} = 28$. Тогда из (16) получаются следующие значения спектрального расстояния $\delta = (\hbar \rho(E))^{-1}$ между соседними уровнями:

N	δ, c^{-1}
3	$1.6 \cdot 10^{11}$
4	$4.5 \cdot 10^8$
5	$6.7 \cdot 10^{6}$
6	$3.0 \cdot 10^5$

Таким образом, при $N \ge 5$ спектральное расстояние δ между соседними уровнями многоатомной молекулы оказывается меньше, чем даже ширина спектральной линии стандартного лазера, $\Delta \omega \sim 10^8 c^{-1}$.

Для возникновения квазиконтинуума недостаточно высокой плотности состояний: нужна высокая плотность состояний с существенными матричными элементами. Практически это эквивалентно требованию хаотичности движения классического аналога.



Для нелинейных осцилляторов в области сплошной хаотичности средняя частота движения и ширина спектра имеют один порядок величины; обозначим его характерной частотой Ω (см. курс NLD). Максимальная спектральная плотность координаты

$$\max S_x \sim \left\langle x^2 \right\rangle \Omega^{-1},\tag{17}$$

'10

$$M\langle x^2 \rangle \Omega^2 \sim \frac{E}{K},$$
 (18)

где M - эффективная масса, K - число колебательных степеней свободы. Принимая, как и выше, $E = 1.16 \ \Im B$, $\Omega = \omega_v = 6.3 \cdot 10^{13} \ c^{-1}$, получаем $S_x \sim K^{-1} \cdot 1.7 \cdot 10^{-31} \ cm^2 c$. Условие возникновения квазиконтинуума дает значение порога

$$\mathcal{E}_{qc} = \frac{\hbar}{e} \sqrt{\frac{\delta}{S_x}} \approx 5.3 \cdot 10^{-3} \sqrt{\delta K} \ \Gamma c \,, \tag{19}$$

где δ - спектральное расстояние между уровнями (в c^{-1}). Используя значения δ из табл. 1, получаем для молекул с различными числами атомов N следующие значения напряженности \mathcal{E}_{qc} электрического поля излучения и его интенсивности I_{qc} , соответствующие порогу возникновения квазиконтинуума:

Ν	${\mathscr E}_{qc}, {\varGamma c}$	$I_{qc}, Bm \ cm^{-2}$
3	$3.7 \cdot 10^3$	$1.6 \cdot 10^9$
4	$2.7 \cdot 10^2$	$9.0 \cdot 10^{6}$
5	41	$2.0 \cdot 10^4$
6	10	$1.2 \cdot 10^4$

Таблица 2

В экспериментах [<u>ЛМ</u>81] возбуждение молекул с N = 4...12 в колебательный квазиконтинуум наблюдалось при интенсивностях ИК излучения $I = 10^4...10^9 Bm cm^{-2}$.

[ЛМ81] - Летохов В.С., Макаров А.А.

Многоатомные молекулы в сильном инфракрасном поле. УФН, 1981, т. <u>134</u>, вып. 1, с. 45-91.

• Эксперименты показали, что основной механизм поглощения энергии многоатомной молекулой в поле ИК излучения состоит в резонансных однофотонных переходах в квазиконтинууме: для диссоциации молекулы важна величина плотности энергии лазерного импульса (fluence)

$$\Phi = \int I(t)dt \,. \tag{20}$$

Получим оценку пороговой величины Φ^* . Примем для энергии диссоциации значение $E_D = 2.32 \Im B = 56 \hbar \omega_v$. Пренебрежем зависимостью спектра мощности координаты $S_x(E,\omega)$ от энергии. Тогда весь эффект поглощения будет обусловлен ростом плотности состояний (см. (5)). Используя (16), можем записать

$$\frac{\rho'}{\rho} = \left(K - 1\right) \frac{1}{E} \approx \frac{2K}{E_D}.$$
(21)

Тогда для скорости поглощения энергии имеем

$$Q = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2 \mathcal{E}^2 S_x \frac{2K}{E_D}.$$
 (22)

а поглощенная за время длительности импульса τ энергия есть

$$\Delta E = Q\tau = \frac{8\pi^2 \omega_v^2 e^2 S_x K}{cE_D} \Phi.$$
⁽²³⁾

Из (17) и (18) получаем для спектральной плотности оценку

$$S_x \approx \frac{E}{KM\omega_v^3}.$$
 (24)

Тогда поглощенная энергия есть

$$\Delta E = 8\pi^2 \frac{e^2}{cM\omega_v} \Phi \,. \tag{25}$$

Приравнивая эту величину энергии диссоциации, находим

$$\Phi^* = \frac{1}{8\pi^2} \frac{cM\omega_v}{e^2} E_D.$$
(26)

При выбранном значении ω_v и E_D , полагая $M = 3.2 \cdot 10^{-23} c$ (что соответствует $A \approx 20$), получаем $\Phi^* = 1.2 \text{ Дж см}^{-2}$. Для диссоциации молекулы SF₆ экспериментальный порог $\Phi^* = 2.0 \text{ Дж см}^{-2}$ [<u>ЛМ</u>81, с. 77].

§ 7.3 Энергетическая диффузия

• Даже в том случае, когда скорости переходов вверх и вниз по спектру равны, энергия системы не остается неизменной: распределение по энергии со временем уширяется. Для простейшей модели с $\dot{W}_{+} = \dot{W}_{-} = \Gamma$ при точно определенном начальном значении энергии ее дисперсия $\Delta E = \overline{E^2} - \overline{E}^2$ меняется на малых временах по закону

$$\Delta E \approx 2\hbar^2 \omega^2 \Gamma t \tag{27}$$

Закон изменения, при котором дисперсия величины растет пропорционально времени, называется диффузионным, а потому и сам процесс уширения распределения системы по энергии называется энергетической диффузией. Отношение $\Delta E/2t = D$ называется коэффициентом энергетической диффузии.

 \Rightarrow Для простейшей модели энергетической диффузии, заданной системой уравнений для вероятностей $w_n(t)$ нахождения системы на *n*-м уровне

$$\dot{w}_n = -2\Gamma w_n + \Gamma \left(w_{n+1} + w_{n-1} \right)$$
 при всех *n* от $-\infty$ до $+\infty$ (28)

с начальным условием $w_n(0) = \delta_{n0}$ найти точное решение для всех $w_n(t)$. Найти закон поведения дисперсии энергии ΔE при $\Gamma t \gg 1$ и асимптотику функции $w_0(t)$ в этой области.

• Если функцию распределения по энергии w(E,t) можно считать гладкой, то из уравнения, описывающего баланс вероятностей при заданной энергии с учетом однофотонных переходов,

$$\frac{dw(E)}{dt} = -w(E)(\dot{W}_{+} + \dot{W}_{-}) + w(E + \hbar\omega)\dot{W}_{+} + w(E - \hbar\omega)\dot{W}_{-}, \quad (29)$$

можно получить описывающее энергетическую диффузию уравнение в частных производных. Раскладывая функцию w(E) в ряд Тейлора до квадратичных по \hbar членов и используя вытекающие из (2) и (4) выражения

$$W_{\pm}(E) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \cdot \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4} \left[S \pm \frac{\hbar\omega}{2} \left(S' + S \frac{\rho'}{\rho} \right) \right],\tag{30}$$

из (29) получаем уравнение энергетической диффузии,

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial E} (Aw) - \frac{\partial}{\partial E} \left(D \frac{\partial w}{\partial E} \right) = 0 \quad , \tag{31}$$

где коэффициенты сноса A и диффузии D даются выражениями

$$A = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2 \mathcal{E}^2 S \frac{\rho'}{\rho}, \qquad D = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2 \mathcal{E}^2 S.$$
(32)

Существенно, что формулы (32) - так же, как и формулы (5) и (6) - не содержат постоянной Планка *ћ*.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #08 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 7 ВЫСШИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

§ 8.01 Высшие порядки ТВ в гармоническом поле

• Все результаты предыдущих разделов были основаны на использовании первой итерации в решениях системы уравнений для амплитуд (см. §2.3)

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_m a_m V_{km}(t) e^{i\omega_{km}t}$$
(1)

с начальным условием $a_k(t_0) = \delta_{kn}$, где δ_{kn} - символ Кронекера. Получив выражение для амплитуд первого приближения,

$$a_m(t) = -\frac{V_{mn}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\omega_{mn}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega} \right],$$
(2)

можно подставить его в правую часть (1) и сделать вторую итерацию, а затем, если необходимо, и последующие. По построению ряд теории возмущений для амплитуд есть разложение по степеням "параметра"

$$\beta = \frac{\widetilde{\Omega}}{\widetilde{\Delta}} << 1 \tag{3}$$

где $\widetilde{\Omega}$ - типичная частота Раби, $\widetilde{\Delta}$ - типичная расстройка.

★ Расстройка на стандартной частоте для перехода из основного в первое активное возбужденное состояние $\tilde{\Delta} = \omega_{01} - \omega$ может меняться от $0.19\omega_s$ (Cs) до $17.0\omega_s$ (He). Поэтому универсально пригодная оценка $\tilde{\Delta}$ не существует: нужно учитывать специфику атомной системы.

Приняв $\tilde{\Delta} \sim \omega_s$, в стандартном случае получаем $\beta \sim 10^{-3}$. Рассмотрение высших членов разложения по столь малому параметру не связано со стремлением уточнить результаты расчетов низших приближений (типичная точность экспериментального определения сечений рассеяния - порядка процентов). Интерес представляют качественно новые эффекты, которые могут быть описаны в высших порядках теории возмущений и доступны экспериментальной регистрации.

◆ Закон изменения дипольного момента системы, найденный в высших порядках теории возмущений, содержит члены, изменяющиеся на частотах, кратных частоте действующего поля. Этот процесс называется *генерацией гармоник* поля. Соответствующее рассеянное излучение может быть экспериментально зарегистрировано даже при небольших мощностях. Это определяет ценность отыскания *нелинейных поляризуемостей* системы - коэффициентов, определяющих амплитуду гармоник дипольно-

го момента. Расчет нелинейной поляризуемости для генерации *N*-й гармоники поля требует, как минимум, использования *N*-го порядка теории возмущений.

• При использовании закона изменения амплитуд состояний системы, найденного в высших порядках теории возмущений, возможно описание резонансных переходов в состояния непрерывного (или квазинепрерывного) спектра, вызванных гармониками внешнего поля: $E_k - E_n = K\hbar\omega$. Эти переходы могут быть интерпретированы как результат процессов многофотонного поглощения (для переходов в непрерывный спектр говорят о *многофотонной ионизации*). Если начальное состояние $|n\rangle$ принадлежит дискретному спектру, $E_n < 0$, то резонансные переходы в непрерывный спектр возможны только при поглощении не менее чем K фотонов, где $K = [E_n/\hbar\omega] + 1$ ([Z]- целая часть числа Z). Расчет скорости этого процесса требует, как минимум, использования K-го порядка теории возмущений.

§ 8.02 Квадратичная поляризуемость

• Для отыскания квадратичной поляризуемости надо непосредственно продолжить расчет, начатый в § 2.3. Волновая функция системы представляется в виде

$$\Psi(t) = \varphi_n + \sum_k a_k^{(1)}(t)\varphi_k + \sum_m a_m^{(2)}(t)\varphi_k , \qquad (4)$$

где $a_k^{(1)}(t)$ - амплитуды, найденные в первом порядке теории возмущений, пропорциональные \mathcal{E} , а $a_m^{(2)}(t)$ - амплитуды второго порядка, пропорциональные \mathcal{E}^2 . Дипольный момент определяется формулой

$$\vec{l}(t) = \langle \Psi(t) | e \hat{\vec{r}} | \Psi(t) \rangle.$$
(5)

Собирая в $\vec{d}(t)$ все члены, пропорциональные \mathcal{E}^2 , запишем вклад второго порядка в дипольный момент в виде

$$d_{\alpha}^{(2)} = \chi_{\alpha\beta\gamma}^{(2)} [0] \mathscr{E}_{\beta} \mathscr{E}_{\gamma} + \chi_{\alpha\beta\gamma}^{(2)} [2\omega] \mathscr{E}_{\beta} \mathscr{E}_{\gamma} \cos 2\omega t.$$
(6)

Оставляя без внимания постоянный вклад, рассмотрим компоненту $\chi^{(2)}_{xxx}[2\omega]$ *тензора квадратичной поляризуемости* квантовой системы, находящейся в стационарном состоянии $|n\rangle$ таком, что $x_{nn} = 0$, и описывающей отклик системы на удвоенной частоте (индекс $[2\omega]$). Для краткости обозначим ее χ_2 .

$$\chi_2(\omega) = \frac{e^3}{2\hbar^2} \sum_{m,k} x_{nm} x_{mk} x_{kn} R_{nmk}(\omega), \qquad (7)$$

где функция $R_{nmk}(\omega)$ зависит только от частот переходов

$$R_{nmk}(\omega) = \frac{1}{2(\omega_{mn} + \omega)(\omega_{kn} - \omega)} + \frac{1}{2(\omega_{mn} - \omega)(\omega_{kn} + \omega)} + \frac{1}{(\omega_{mn} + \omega)(\omega_{kn} + 2\omega)} + \frac{1}{(\omega_{mn} - \omega)(\omega_{kn} - 2\omega)}.$$
(8)

Функции $R_{nmk}(\omega)$ можно также придать компактный вид

$$R_{nmk}(\omega) = 3 \frac{\omega_{mn}\omega_{kn}^3 + \omega^2 \omega_{kn}^2 - 2\omega^2 \omega_{mn}\omega_{kn}}{(\omega_{mn}^2 - \omega^2)(\omega_{kn}^2 - \omega^2)(\omega_{kn}^2 - 4\omega^2)}.$$
(9)

 \Rightarrow Задача. Нарисовать график функции $R_{nmk}(\omega)$ для случая, когда $|n\rangle$ есть основное состояние системы.

• Если состояния системы обладают определенной четностью, то все "треугольники" матричных элементов $x_{nm}x_{mk}x_{kn}$ тождественно равны нулю в силу правил отбора по четности. Для отличия χ_2 в дипольном приближении от нуля необходимо, чтобы стационарные состояния системы не обладали определенной четностью. Это может быть достигнуто помещением атома во внешнее электростатическое поле с низкой симметрией - например, во внутрикристаллическое поле в нецентросимметричном кристалле. Для квадратичной поляризуемости атома в основном состоянии в области низких частот (для $\omega \ll \min \omega_{kn}$), принимая для дополнительного матричного элемента значение $x_{ii} \sim a_0$, из формулы (7) получим оценку

$$\chi_2^{(d)}(\omega_s) \sim \frac{1}{\mathcal{E}_a} \cdot \left(\frac{\omega_a}{\omega_{01}}\right) \chi_1(0).$$
 (10)

Величина $\mathscr{E}_p = \mathscr{E}_a(\omega_{01}/\omega_a)$ может рассматриваться как характерное "*поле поляризуемости*".

• Рассмотрим улучшенную оценку статической поляризуемости атома в основном состоянии, учтя зависимость от частоты ω_{01} перехода в первое активное возбужденное состояние и используя теорему о сумме сил осцилляторов (6.5). По этой теореме

$$\sum 2x_{kn}^2 \omega_{kn} = \frac{\hbar}{m} \tag{11}$$

Считая, что в сумме по k, входящей в выражение для восприимчивости (5.6), дает вклад только первое слагаемое (приписав переходу $0 \rightarrow 1$ силу осциллятора f = 1), получим оценку

$$\chi_1(0) \approx \frac{e^2}{\hbar} \frac{\hbar}{m} \frac{1}{\omega_{01}^2} \approx a_0^3 \left(\frac{\omega_a}{\omega_{10}}\right)^2 \tag{12}$$

Для атома водорода $\omega_{10} = (3/8)\omega_a$, и оценка (12) дает значение $\chi_1(0) \approx 7.1a_0^3$ (точно $\chi_1(0) = 4.5a_0^3$). Для атома цезия $\hbar\omega_{10} = 1.38 \ \beta B = 0.051\hbar\omega_a$, и оценка дает $\chi_1(0) \approx 390a_0^3$ (точный расчет $\chi_1(0) \approx 400a_0^3$).

Высокое качество приближения объясняется тем, что часто переход из основного в первое возбужденное состояние является доминирующим. Примеры значений: для $H_1: (1s \rightarrow 2p) f = 0.42;$ для Na: $(3s \rightarrow 3p) f = 0.98$.

• Если положить $\hbar\omega_{01} = 5 \ \Im B \gg \hbar\omega_s$ и использовать для оценки поляризуемости улучшенную оценку (12), то получатся следующие числовые значения амплитуды поля поляризуемости

$$\mathcal{E}_{p} = 0.18 \mathcal{E}_{a} = 3.2 \cdot 10^{6} \, \Gamma c \,, \tag{13}$$

и квадратичной восприимчивости

$$\chi_2^{(d)}(\omega_s) \cong 2.5 \cdot 10^{-31} \, c \, m^3 \, \Gamma c^{-1} \,. \tag{14}$$

★ Найденная оценка может быть использована для определения квадратичной поляризуемости κ_2 нецентросимметричных ионных кристаллов: $\kappa_2 = n\chi_2$, где $n \sim 5 \cdot 10^{22} c M^{-3}$ есть типичная плотность атомов в конденсированных веществах. Числовая оценка дает $\kappa_2 \sim 1 \cdot 10^{-8}$. Величины $\kappa_2(\omega_s)$ для кристаллов, широко используемых в нелинейной оптике, таковы: для LiNbO₃ $\kappa_2 = 1.3 \cdot 10^{-8}$, для KH₂PO₄ $\kappa_2 = 1.3 \cdot 10^{-9}$.

☆ Задача. Оценить квадратичную поляризуемость $\chi_2 \equiv \chi^{(2)} [2\omega]$ частицы, находящейся в основном состоянии в потенциале смещенной параболической ямы

$$U(x) = \frac{m\Omega^2}{2}(x-a)^2$$

(потенциал и стационарные состояния не обладают определенными четностями).

• Квадратичная поляризуемость в общем случае окажется отличной от нуля и для систем, инвариантных при инверсии и имеющих определенную четность состояний, если уточнить модель внешнего поля учетом пространственной неоднородности (см. § 2.2). При этом в гамильтониане появится дополнительный член, описывающий квадрупольное взаимодействие [ЛЛП, §42]:

$$\hat{V}_{Q}(\vec{r},t) = -\frac{1}{2}Q_{\alpha\beta}(\nabla_{\alpha}\mathcal{E}_{\beta}(\vec{r},t)), \qquad (15)$$

где $Q_{\alpha\beta}$ - компоненты тензора квадрупольного момента $Q_{\alpha\beta} = ex_{\alpha}x_{\beta}$. Матричные элементы этого оператора отличны от нуля между состояниями одинаковой четности и имеют порядок величины

$$V_{nk}^{(Q)} \sim \alpha \frac{\omega}{\omega_a} e a_0 \mathcal{E}, \qquad (16)$$

что приводит к оценке квадратичной поляризуемости атома

$$\chi_2^{(Q)}(\omega_s) \sim \alpha \left(\frac{\omega_s}{\omega_a}\right) \chi_2^{(d)}(\omega_s).$$
 (17)

Численное значение $\chi_2^{(Q)}(\omega_s) \cong 7.8 \cdot 10^{-35} \, cm^3 \, \Gamma c^{-1}$ в $3 \cdot 10^3$ раз меньше, чем в случае снятия правил отбора по четности внутрикристаллическим полем. Задача. Вычислить квадратичную поляризуемость свободного электрона на частоте второй гармоники $\chi_2 \equiv \chi^{(2)}[2\omega]$ и сравнить ее с приведенными выше оценками.

§ 8.03 Высокочастотное разложение квадратичной поляризуемости

• Подход, использованный в § 6.1 для определения высокочастотной асимптотики линейной поляризуемости, может быть применен и для квадратичной поляризуемости. Рассмотрим ВЧ асимптотику $\chi_2(\omega)$. Старший член в разложении формулы (7) по ω^{-2} имеет вид

$$\chi_{2}^{(4)} = -\frac{3}{4}\omega^{-4} \frac{e^{3}}{2\hbar^{2}} \sum_{m,k} x_{nm} x_{mk} x_{kn} \left(\omega_{kn}^{2} - 2\omega_{mn}\omega_{kn}\right).$$
(18)

Рассмотрим входящую в это выражение сумму T_4 . Учитывая тождество $\omega_{kn} = \omega_{km} + \omega_{mn}$, ее можно переписать в виде

$$T_{4} = -\sum_{m,k} x_{nm} (\omega_{mk} x_{mk}) (\omega_{kn} x_{kn}) + \sum_{m,k} (\omega_{nm} x_{nm}) x_{mk} (\omega_{kn} x_{kn}).$$
(19)

Учитывая соотношение $m\omega_{kn}x_{kn} = -ip_{kn}$, связывающее матричные элементы координаты и импульса, получаем

$$T_{4} = \frac{1}{m^{2}} \sum_{m,k} \left(x_{nm} p_{mk} p_{kn} - p_{nm} x_{mk} p_{kn} \right) =$$

$$= \frac{1}{m^{2}} \sum_{k} \left\langle n \| [\hat{x}, \hat{p}] \| k \right\rangle \left\langle k \| \hat{p} \| n \right\rangle = 0.$$
(20)

Высокочастотное разложение квадратичной восприимчивости $\chi_2(\omega)$ начинается с члена порядка не ниже ω^{-6} .

Член порядка ω⁻⁶ в разложении имеет вид

$$\chi_{2}^{(6)} = -\frac{3}{16}\omega^{-6}\frac{e^{3}}{2\hbar^{2}}\sum_{m,k}x_{nm}x_{mk}x_{kn}F^{(6)}(\omega_{mn},\omega_{kn}), \qquad (21)$$

$$F^{(6)}(\omega_{mn},\omega_{kn}) = 5\omega_{kn}^{4} + 6\omega_{nm}\omega_{kn}^{3} + 4\omega_{mn}^{2}\omega_{kn}^{2} + 8\omega_{nm}^{3}\omega_{kn}.$$
 (22)

В результате алгебраических преобразований входящая в выражение для $\chi_2^{(6)}$ сумма T_6 может быть сведена к виду среднего по состоянию $|n\rangle$ значения двойного коммутатора:

$$T_6 = -\frac{2}{3m^3} \langle n | [p, [p, U']] | n \rangle = \frac{2}{3m^3} \hbar^2 \langle U''' \rangle$$
(23)

(штрихи означают дифференцирование потенциала по координате *x*). В итоге для главного члена высокочастотного разложения квадратичной восприимчивости получаем выражение [SB95]

$$\chi_2^{(6)} = -\frac{e^3}{16m^3} \omega^{-6} \langle U''' \rangle \quad . \tag{24}$$

Главный член высокочастотного разложения квадратичной восприимчивости частицы, находящейся в стационарном состоянии в поле потенциала $U(\vec{r})$, пропорционален среднему значению третьей производной потенциала в этом состоянии и обратно пропорционален шестой степени частоты.

[SB95] - Scandolo S., Bassani F.

Kramers-Kronig relations and sum rules for the second-harmonic susceptibility Phys. Rev. B, 1995, vol. 51, n. 11, pp. 6925-7.

§ 8.04 Высокочастотная асимптотика квадратичной восприимчивости: классический подход

◆ Выше для главного члена высокочастотного разложения квадратичной восприимчивости из квантовой формулы получено выражение (24), которое не содержит постоянной Планка ħ, что указывает на возможность его классического вывода. Рассмотрим ВЧ асимптотику квадратичной поляризуемости в классической модели с уравнением движения

$$m\ddot{x} + U'(x) = e\mathcal{E}\cos\omega t.$$
⁽²⁵⁾

Пусть $x_0(t)$ - невозмущенный (найденный при $\mathscr{E} = 0$) закон движения. Считая возмущение малым, представим решение возмущенной задачи в виде $x(t) = x_0(t) + \xi(t)$, где $\xi(t) \sim \mathscr{E}$ - линейный отклик. Подставляя x(t) в уравнение движения и линеаризуя его по ξ , получаем уравнение для отклика

$$m\ddot{\xi} + U''\xi = e\mathcal{E}\cos\omega t \tag{26}$$

При $\omega \rightarrow \infty$ можно пренебречь вторым членом в левой части и найти $\xi(t)$:

$$\xi(t) \approx -\frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \cos\omega t \tag{27}$$

'10

В следующем приближении положим $x(t) = x_0(t) + \xi(t) + \eta(t)$, где $\eta(t) \sim \mathcal{E}^2$ - квадратичный отклик. Подставляя x(t) в уравнение движения (25) и приравнивая члены второго порядка по полю, получаем

$$m\ddot{\eta} + U''\eta = -\frac{U'''}{2}\xi^2.$$
 (28)

Считая, что функция U'''(t) меняется со временем медленно в сравнении со внешним полем, для квадратичного отклика на удвоенной частоте на данном небольшом интервале времени получаем

$$\eta(t) \approx -\frac{U'''}{16} \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m^3 \omega^6} \cos 2\omega t \tag{29}$$

Усредняя эту величину по времени (или по инвариантной компоненте классического невозмущенного движения), получаем для высокочастотной асимптотики квадратичной поляризуемости

$$\chi_2 \approx -\frac{e^3}{16m^3} \omega^{-6} \langle U''' \rangle \tag{30}$$

которая в точности совпадает с результатом квантового расчета.

☆ Задача. Найти следующий член ВЧ разложения квадратичной поляризуемости $\chi_2[2\omega]$.

§ 8.05 Кубичная и другие поляризуемости

• Итерационные уравнения для амплитуд $a_k(t)$ интегрируются элементарно, и формулы для $a_k^{(N)}$ можно выписать в любом желаемом порядке N. Правила, облегчающие получение таких выражений, изложены в [<u>ДК</u>78, с.33-38].

🚇 [<u>ДК</u>78] - Делоне Н.Б., Крайнов В.П.

Атом в сильном световом поле.

М.: Атомиздат, 1978. - 287 с.

Выражения высших порядков громоздки: $a_k^{(N)}$ содержит сумму 2^N слагаемых с разными зависимостями от ω_{nm} и ω . Содержательная же часть расчетов - вычисление матричных элементов, частот переходов и бесконечных сумм их комбинаций - не элементарна. Поэтому мы ограничимся простыми оценками, вид которых легко установить. При каждой новой итерации в числитель амплитуды войдет множитель $V_{mn}/\hbar \sim \tilde{\Omega}$, а интегрирование по времени добавит в знаменатель множитель, представляющий линейную комбинацию частот ω_{nm} и ω : оценим ее как типичную расстройку $\tilde{\Delta}$. Зависимость дипольного момента от времени в порядке N будет содержать те же гармоники, что и функция $\cos^N \omega t$. Так, члены третьего порядка по полю дадут в дипольный момент вклад

$$\vec{d}_3(t) = \vec{d}_3[\omega] \cos\omega t + \vec{d}_3[3\omega] \cos 3\omega t.$$
(31)

Первый член описывает изменение линейной поляризуемости под действием внешнего поля, а второй описывает генерацию третьей гармоники. В выражение для поляризуемости третьего (и вообще любого нечетного) порядка входят "контуры" из четного числа матричных элементов вида $x_{nm}x_{ml}...x_{kn}$. В таких контурах все переходы могут быть разрешены по четности. Отсюда получается оценка $\chi_3 \sim \mathcal{E}_p^{-2} \chi_1$, где \mathcal{E}_p - "поле поляризуемости" (см. (10)). Аналогичное соотношение,

$$\chi_N \sim \mathscr{E}_p^{1-N} \chi_1 \tag{32}$$

получается для высших поляризуемостей (нечетных порядков – или всех порядков в системах с сильно нарушенной симметрией). Для поляризуемостей четных порядков тех систем, состояния которых обладают определенной четностью, один из матричных элементов в контуре надо заменить квадрупольным (16), что приводит к оценке

$$\chi_N \sim \alpha \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right) \mathcal{E}_p^{1-N} \chi_1$$
 (33)

★ Выше мы получили для прозрачных диэлектриков оценку $\mathscr{E}_p = 3.2 \cdot 10^6 \, \Gamma c$. Ее можно сравнить с величинами \mathscr{E}_p , определенными по измеренным значениям высших поляризуемостей. Так, из значения κ_4 для формиата лития (LFM) получается $\mathscr{E}_p = 5.2 \cdot 10^6 \, \Gamma c$, а из κ_5 для кальцита (CaCO₃) - $\mathscr{E}_p = 3.6 \cdot 10^6 \, \Gamma c$

☆ Задача. Оценить кубичную поляризуемость $\chi_3[3\omega]$ атома Na на стандартной частоте ω_s .

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #09 НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ- 8 ВЫСШИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ – 2 АЛЬТЕРНАТИВЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

TEST #04

§ 9.1 Многофотонная ионизация: простая оценка скорости

• При рассмотрении переходов в непрерывный спектр с помощью первого порядка теории возмущений в § 3.2 было установлено, что такие резонансные переходы возможны, если энергия фотона $\hbar\omega$ превосходит энергию связи электрона в начальном состоянии: $E_k = E_n + \hbar\omega > 0$. Если это условие не выполнено, то скорость переходов в первом порядке теории возмущений равна нулю, и для описания процесса фотоионизации надо использовать высшие порядки теории возмущений. Начнем со второго порядка. Если $a_m(t)$ - амплитуды состояний дискретного спектра, то вероятность перехода в одно из состояний ν непрерывного спектра дается формулой

$$W_{\nu}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \sum_{m} \int_{-\infty}^{t} V_{\nu m}(t') a_{m}(t') e^{i\omega_{\nu m}t'} dt' \right|^{2}$$
(1)

Поскольку однофотонного перехода в непрерывный спектр нет, амплитудой начального состояния $a_n \approx 1$ можно пренебречь. Для амплитуд других состояний дискретного спектра $a_m(t)$ можно использовать выражения, найденные выше (в § 2.3) по теории возмущений. Поскольку основной вклад в амплитуды состояний, лежащих по энергии выше начального, дает компонента возмущения с отрицательной частотой (см. § 3.2), сохраним только ее, положив $\hat{V}(t) = \hat{V}e^{-i\omega t}/2$. Тогда в первом порядке теории возмущений имеем

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{V_{mn}}{2\hbar} \cdot \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega},$$
(2)

Здесь подразумевается, что $\omega_{kn} > 0$, где $|n\rangle$ - начальное состояние. Подстановка (11) в (10) дает выражение для вероятности перехода во втором порядке:

$$W_{n\nu}^{(2)}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \sum_{m} \int_{-\infty}^{t} \frac{V_{\nu m} V_{mn}}{4\hbar(\omega_{mn} - \omega)} e^{i(\omega_{\nu n} - 2\omega)t'} dt' \right|^2$$
(3)

Зависимость от времени всех членов в сумме одинакова. Определим составной матричный элемент второго порядка соотношением L09

$$\widetilde{V}_{\nu n}^{(2)} = \sum_{m} \frac{V_{\nu m} V_{mn}}{4\hbar(\omega_{mn} - \omega)}$$
(4)

Тогда можно придать формуле для вероятности перехода вид

$$W_{n\nu}^{(2)}(t) = \frac{\left| \tilde{V}_{\nu n}^{(2)} \right|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t e^{-i2\omega t' + i\omega_{\nu n} t'} dt' \right|^2$$
(5)

Это выражение отличается от найденного ранее (в § 3.2) для случая однофотонной ионизации только обозначениями. Если состояние с энергией $E_k = E_n + 2\hbar\omega$ принадлежит непрерывному спектру, то из (5) сразу следует ответ: скорость двухфотонной ионизации определяется выражением

$$\dot{W}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \tilde{V}_{n\vec{k}}^{(2)} \right|^2 \rho(E_k).$$
(6)

Оно представляет обобщение золотого правила Ферми на второй порядок теории возмущений.

• Из определения составного матричного элемента (4) следует оценка

$$\widetilde{V}_{n\nu}^{(2)} \sim \frac{\widetilde{\Omega}}{\widetilde{\Delta}} V_{n\nu} \approx \beta V_{n\nu}.$$
(7)

Она легко обобщается на расчет в высших порядках теории возмущений: $\tilde{V}_{nv}^{(K)} \sim \beta^{K-1} V_{nv}$. Скорость *K*-фотонной ионизации можно оценить так:

$$\dot{W}^{(K)} \sim \beta^{2(K-1)} \dot{W}^{(1)}$$
 (8)

где $\dot{W}^{(1)}$ - скорость однофотонной ионизации полем частоты $K\omega$. Оценка (8) правильно передает зависимость скорости ионизации от интенсивности поля, но требует деликатного подхода к оценке параметра β .

★ Пример. Рассмотрим ионизацию атома натрия излучением стандартного лазера. Потенциал ионизации в этом случае равен $\hbar\omega_I = 5.14 \ B = 4.42\hbar\omega_s$, и для перехода в непрерывный спектр необходимо поглощение 5 фотонов. Если, как то мы делали раньше, взять в качестве матричного элемента дипольного момента перехода величину $d_s = ea_0$, а эффективную расстройку оценить частотой излучения, $\tilde{\Delta} = \omega_s$, то из формулы (8) получим $\dot{W}^{(5)} \approx 7.8 \cdot 10^{-17} c^{-1}$. Количественные расчеты дают для этих условий значение $\dot{W}^{(5)} \approx 8.2 \cdot 10^{-10} c^{-1}$, на семь порядков большее.

• При оценке величины составного матричного элемента высокого порядка следует учесть увеличение матричных элементов переходов между возбужденными состояниями и уменьшение расстроек, связанное со сгущением уровней в атомных спектрах вблизи границы континуума. В итоге параметр теории возмущений $\beta = \tilde{\Omega}/\tilde{\Delta}$ может стать гораздо больше принятого нами значения $\beta_s = ea_0 \mathcal{E}/\hbar\omega_s$.

• В экспериментах по многофотонной ионизации мишень представляет собой атомный пучок с плотностью атомов $n \le 10^{12} cm^{-3}$ и поперечным сечением $D \le 1 \, cm$. Поперечник лазерного луча в фокусе $d \approx 10^{-2} \, cm$, а глубина области фокусировки $l \sim 10d \approx 10^{-1} cm$. Таким образом, одновременно действию излучения подвергается $N \approx nd^2 l \approx 10^7$ атомов. Детектор регистрирует лишь часть (n ≈ 10⁻²) вылетевших электронов. Поэтому эксперименты должны проводиться при условиях, когда вероятность W ионизации атома под действием импульса длительностью τ , $W = \dot{W}\tau$, велика в сравнении с $(N\eta)^{-1}$ (регистрируются фотоэлектроны) и мала в сравнении с единицей (нет насыщения). Середине этого диапазона, $W = (N\eta)^{-1/2}$, для соответствует $\tau \approx 10^{-8} \, cM$ Na при интенсивность атомов $I_{\text{exp}} = 820I_s = 8.3 \cdot 10^{10} Bm \ cm^{-2}$. Уместен вопрос: применима ли при таких интенсивностях теория возмущений? Даже стандартная оценка параметра теории возмущений дает в этом случае $\beta_s = 0.035$, а сверх того надо учесть и перечисленные в предыдущем пункте факторы. Мы вернемся к обсуждению этих вопросов при рассмотрении альтернативных теорий ионизации атома в поле сильной электромагнитной волны. А пока декларируем результат:

Существует область значений интенсивности, в которой наблюдаемая фотоионизация атомов может быть описана теорией возмущений. Скорость ионизации оказывается пропорциональной интенсивности излучения, взятой в степени, равной числу фотонов, необходимому для перевода системы из начального состояния в непрерывный спектр. Однако граница применимости теории возмущений недалека от экспериментального окна.

§ 9.2 Альтернативы теории возмущений

• Все предыдущие расчеты эволюции квантовой системы в состоянии $|n\rangle$ под действием гармонического поля $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t$ основывались на формуле первого порядка теории возмущений для амплитуд, полученной в § 2.3:

$$a_m(t) = -\frac{V_{mn}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{mn} - \omega)t}}{\omega_{mn} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn} + \omega)t}}{\omega_{mn} + \omega} \right].$$
(9)

Это выражение применимо до тех пор, пока все описываемые им амплитуды $a_m(t)$ малы.

• Такое условие заведомо не выполняется в случае изолированного резонанса, когда $\omega \rightarrow \omega_{mn}$ только для одного состояния $|m\rangle$. Изолированный

резонанс возможен в любой системе с неэквидистантным спектром при сколь угодно малом возмущении. Если при этом для всех остальных состояний $|k\rangle \neq |m\rangle, |n\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_k(t)| \ll 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле вводится модель *двухуровневой системы*, учитывающая амплитуды только двух состояний системы \hat{H}_0 , связанных резонансным переходом.

• Особый случай представляет модель *гармонического осциллятора*. В силу эквидистантности спектра для нее резонансными становятся одновременно переходы между всеми соседними уровнями, и двухуровневое приближение неприменимо. Эта модель должна быть рассмотрена отдельно.

• Рассмотрим модель слабо ангармонического осциллятора, спектр которого имеет вид

$$E_n = \hbar \omega_v \left(n - \frac{\kappa}{2} n^2 \right) \tag{10}$$

где к «1 - параметр нелинейности. Если система находится в состоянии $|n\rangle$ и внешнее поле находится в точном резонансе с частотой $\omega_u = \omega_{n+1,n}$ перехода в состояние $|n+1\rangle$, то амплитуда перехода в другое соседнее состояние $|n-1\rangle$ будет мала при условии малости параметра

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\kappa \omega_v},\tag{11}$$

где Ω - частота Раби. Если $\beta_r \ge 1$, то модель двухуровневой системы теряет применимость: при этом условии возмущение находится в резонансе со многими переходами. Такую ситуацию называют *квантовым нелинейным резонансом*. Если при этом выполняется неравенство

$$\beta_{+} = \frac{\Omega}{\omega} \ll 1, \qquad (12)$$

то эффективно приближение вращающегося поля, в котором в операторе возмущения учитываются только резонансные частотные компоненты:

$$V_{mn} \cos \omega t \to \frac{1}{2} V_{mn} \exp\left[-i(\operatorname{sign}\omega_{mn})\omega t\right]$$
(13)

Так строится модель для описания квантового нелинейного резонанса в приближении вращающегося поля. Мы будем называть ее моделью *много-уровневого резонанса*.

• Наконец, если $\beta_+ \ge 1$, то теряет применимость приближение вращающегося поля. В этой области "нормальные" (поглощение фотона приводит к увеличению энергии системы) и "аномальные" (поглощение фотона приводит к уменьшению энергии системы) процессы одинаково эффективны. Область $\beta_+ \ge 1$ назовем областью *сильного поля*. ★ Модель ангармонического осциллятора эффективна для квазиклассических систем. Положим $\omega_v = 0.041\omega_s = 7.26 \cdot 10^{13} c^{-1}$, $d = ea_0 = 2.54 \ \text{Д6}$, $\kappa = 10^{-2}$ - параметры, типичные для двухатомных молекул. Тогда порог многоуровневого резонанса $\beta_r = 1$ достигается в резонансном поле амплитуды $\mathcal{E}_r = 300 \ \Gamma c$ с интенсивностью $I_r = 1.1 \cdot 10^7 \ Bm \ cm^{-2}$, а порог сильного поля $\beta_+ = 1$ - при амплитуде $\mathcal{E}_+ = 3 \cdot 10^4 \ \Gamma c$, что соответствует интенсивности $I_+ = 1.1 \cdot 10^{11} \ Bm \ cm^{-2}$. Таким образом, все четыре случая – пертурбативный, резонансный двухуровневый, резонансный многоуровневый и случай сильного поля – лежат в области значений интенсивности, доступных современному эксперименту.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #10 ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА - 1

§ 10.1 Построение модели

• Если частота ω гармонического электромагнитного поля, действующего на квантовую систему, находящуюся в состоянии $|n\rangle$, близка к частоте одного из переходов ω_{mn} настолько, что найденная по теории возмущений амплитуда $a_m(t)$ не мала, и если при этом для всех остальных состояний $|k\rangle \neq |m\rangle, |n\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_k(t)| \ll 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле этими амплитудами можно пренебречь. Обозначим заново существенные стационарные состояния невозмущенной системы: $|n\rangle \equiv |1\rangle$ и $|m\rangle \equiv |2\rangle$. Будем предполагать, что $\omega_{21} > 0$. Состояние системы *S* может быть приближенно описано ВФ вида

$$\Psi(t) = A(t)\varphi_1(\vec{r}) + B(t)\varphi_2(\vec{r}) = = a(t)e^{-i\omega_1 t}\varphi_1(\vec{r}) + b(t)e^{-i\omega_2 t}\varphi_2(\vec{r}).$$
(1)

Модель с произвольным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ и вектором состояния вида (1) называется *двухуровневой системой*. Величины *A* и *B* будем называть *быстрыми*, а *a* и *b* - *медленными амплитудами* состояний двух-уровневой системы.

• Уравнения для медленных амплитуд a(t) и b(t) в гармоническом поле $\hat{V}(t) = \hat{V} \cos \omega t$ можно получить, оставив от системы (2.22) только два уравнения:

$$i\hbar \frac{db}{dt} = \frac{a}{2} \bigg[V e^{i(\omega_{21} + \omega)t} + V^* e^{i(\omega_{21} - \omega)t} \bigg],$$

$$i\hbar \frac{da}{dt} = \frac{b}{2} \bigg[V e^{-i(\omega_{21} - \omega)t} + V^* e^{-i(\omega_{21} + \omega)t} \bigg].$$
(2)

где $V = V_{12}$ - матричный элемент возмущения (в модели двухуровневой системы обычно предполагается, что диагональные матричные элементы возмущения равны нулю: $V_{11} = V_{22} = 0$). Непосредственное аналитическое решение системы уравнений (2) представляет значительные трудности. Действительно, на языке теории колебаний мы имеем дело с четырехмерной (K = 4) системой (a и b комплексны), находящейся под параметрическим квазипериодическим двухчастотным возмущением.

• Упрощение системы (2) возможно, если возмущение не слишком велико - мал параметр

$$\beta_{+} = \frac{V}{\hbar\omega_{21}}.\tag{3}$$

★ Если $\hat{V} = -\vec{d}\vec{E}(t)$ - оператор дипольного взаимодействия, а $\omega_{21} = \omega_s$, то условие $\beta_+ = 1$ выполняется при напряженности поля излучения $\mathcal{E}_+ = 7.32 \cdot 10^5 \, \Gamma c$, которому соответствует интенсивность $I_+ = 6.4 \cdot 10^{13} \, Bm \, cm^{-2} = 6.4 \cdot 10^5 \, I_s$.

В этом случае для описания переходов в условиях, близких к резонансу, можно использовать *приближение вращающегося поля*, сохранив в уравнениях только те (резонансные) члены, в которых показатели экспонент в резонансе обратятся в ноль. Тогда система (2) примет вид

$$i\frac{da}{dt} = b\frac{\Omega}{2}e^{-i\Delta t}, \quad i\frac{db}{dt} = a\frac{\Omega^*}{2}e^{i\Delta t}, \tag{4}$$

где $\Omega = V_{12}/\hbar$ есть частота Раби. С точки зрения теории колебаний, переход к приближению вращающегося поля заменяет квазипериодическое двухчастотное воздействие на гармоническое.

★ Доказать, что величина $J_1 = |a|^2 + |b|^2$ является интегралом движения системы (4).

Система (4) может быть сведена к уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами

$$\frac{d^2b}{dt^2} - i\Delta \frac{db}{dt} + \frac{\left|\Omega\right|^2}{4}b = 0,$$
(5)

общее решение которого имеет вид

$$b(t) = b_1 \exp i\left(\frac{\Delta + \Omega_+}{2}t\right) + b_2 \exp i\left(\frac{\Delta - \Omega_+}{2}t\right),\tag{6}$$

где введено обозначение

$$\Omega_{+} = \sqrt{\left|\Omega\right|^{2} + \Delta^{2}} \,. \tag{7}$$

Соответственно, общее решение для амплитуды a(t) есть

$$a(t) = a_1 \exp -i\left(\frac{\Delta - \Omega_+}{2}t\right) + a_2 \exp -i\left(\frac{\Delta + \Omega_+}{2}t\right).$$
(8)

Выберем начальные условия в виде a(0) = 1, b(0) = 0. Тогда зависимость амплитуды состояния $|2\rangle$ имеет вид

$$b(t) = i \frac{|\Omega|}{\Omega_{+}} e^{i \frac{\Delta t}{2}} \sin \frac{\Omega_{+}}{2} t.$$
(9)

Вероятность перехода в состояние $|2\rangle$ определяется формулой

$$W_{12} = \frac{|\Omega|^2}{\Omega_+^2} \sin^2 \frac{\Omega_+}{2} t \quad . \tag{10}$$



Зависимость вероятности перехода из основного состояния в возбужденное от времени в гармоническом поле в модели двухуровневой системы при точном резонансе (сплошная линия) и при расстройке $\Delta = 0.5\Omega$ (пунктир).

В двухуровневой системе под действием гармонического поля с расстройкой $\Delta = \omega_{21} - \omega$ вероятность перехода меняется со временем по гармоническому закону с частотой $\Omega_+ = \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}$. Частота и амплитуда осцилляций вероятностей **растут** при увеличении возмущения.

☆ Задача. Проверить, переходит ли выражение (10) в результат (2.38), найденный в §2.4 по теории возмущений для малого интервала времени после внезапного включения резонансного поля.

 \Rightarrow Задача. Исследовать при малой величине Ω/Δ поправку к частоте осцилляций амплитуды b(t), отличающую результат двухуровневой модели от результата теории возмущений.

§ 10.2 Вектор Блоха и уравнения Блоха

• Состояния двухуровневой системы, взаимодействующей с переменным полем, удобно описывать с помощью компонент *вектора Блоха* - комбинаций амплитуд состояний 1 и 2, тесно связанных с наблюдаемыми величинами. Если двухуровневая система находится в состоянии с ВФ

$$\Psi(t) = A(t)\phi_1(\vec{r}) + B(t)\phi_2(\vec{r}),$$
(11)

то по определению компоненты вектора Блоха P,Q и R есть

$$P = A^*B + AB^*, \quad Q = i(A^*B - AB^*), \quad R = |B|^2 - |A|^2.$$
(12)

Величина R - разность населенностей уровней 2 и 1 - называется *продоль*ной компонентой, а P и Q поперечными компонентами. Величина R может быть связана с мгновенным значением средней энергии системы: $\langle E \rangle = \hbar \omega_{21} R$. Величины P и Q пропорциональны действительной и мнимой частям вектора дипольного момента системы. Если матричный элемент перехода имеет вид

$$\vec{d}_{12} = \langle 1 | e\vec{r} | 2 \rangle = \vec{d}_1 + i\vec{d}_2,$$
 (13)

где $\vec{d_1}$ и $\vec{d_2}$ - действительные векторы, то дипольный момент в состоянии с волновой функцией (11) есть $\vec{d} = P\vec{d_1} + Q\vec{d_2}$. Практически всегда можно выбрать функции $\varphi_1(\vec{r})$ и $\varphi_2(\vec{r})$ действительными и положить $\vec{d_2} = 0$, что мы и предполагаем в дальнейшем.

• Найдем вид динамических уравнений для величин P,Q и R в переменном поле. Если $\vec{d_2} = 0$, тогда в переменном электрическом поле $\vec{Ef}(t)$ частота Раби $\Omega = \vec{d_1}\vec{E}/\hbar$ будет действительна. Уравнения для быстрых амплитуд имеют вид

$$i\frac{dA}{dt} = \omega_1 A + B\Omega f(t), \quad i\frac{dB}{dt} = \omega_2 B + A\Omega f(t).$$
(14)

Из этой системы уравнений и определения компонент вектора Блоха следует система уравнений Блоха

$$\frac{dP}{dt} = -\omega_{21}Q, \quad \frac{dQ}{dt} = \omega_{21}P - 2\Omega f(t)R, \quad \frac{dR}{dt} = 2\Omega f(t)Q. \quad (15)$$

Система имеет первый интеграл $J_1 = P^2 + Q^2 + R^2 \equiv S^2$. Учитывая условие нормировки ВФ $|A|^2 + |B|^2 = 1$, находим, что $S^2 = 1$. Таким образом, величины P,Q и R можно рассматривать как декартовы компоненты вектора единичной длины, а состояние системы изображать точкой на сфере единичного радиуса - *сфере Блоха*.

• Описание двухуровневой системы амплитудами A, B требует задания четырех действительных параметров (Re A, B и Im A, B), подчиненных одному условию нормировки. Описание с помощью компонент вектора Блоха требует задания **трех** действительных параметров P, Q и R, подчиненных одному условию нормировки. Какую информацию содержит опущенный при переходе от амплитуд к компонентам вектора Блоха параметр?

★ Заметим, что если записывать волновую функцию двухуровневой системы как столбец,

$$\Psi = \begin{vmatrix} B\phi_2 \\ A\phi_1 \end{vmatrix}$$

то величины P,Q и R, можно представить в виде средних значений матриц Паули:

$$P = \langle \Psi | \sigma_1 | \Psi \rangle, \quad Q = \langle \Psi | \sigma_2 | \Psi \rangle, \quad R = \langle \Psi | \sigma_3 | \Psi \rangle$$

Матрицы Паули пропорциональны компонентам оператора спинового момента для частицы со спином 1/2. В силу этого сходства вектор Блоха называют также вектором *квазиспина* или энергетического спина.

• Обратимся к рассмотрению эволюции двухуровневой системы в гармоническом переменном поле $f(t) = \cos \omega t$ в случае, близком к резонансу. Если выполнено условие $\beta_+ \ll 1$ (т.е. если $\Omega \ll \omega_{21}, \omega$), то скорости изменения поперечных компонент *P* и *Q* значительно больше скорости изменения разности населенностей R. Для рассмотрения окрестности резонанса удобно перейти к компонентам вектора Блоха во вращающейся с угловой скоростью ω системе координат. В такой системе скорости изменения компонент вектора Блоха будут иметь одинаковый порядок величин.

Введем переменные

$$\boldsymbol{U} = P\cos\omega t + Q\sin\omega t, \, \boldsymbol{V} = -P\sin\omega t + Q\cos\omega t, \, \boldsymbol{W} = -R \,. (16)$$

В этих переменных система уравнений Блоха (15) примет следующий вид:

$$\dot{u} = -\Delta v + \Omega w \sin 2\omega t,$$

$$\dot{v} = \Delta u + 2\Omega w \cos^2 \omega t,$$

$$\dot{w} = -2\Omega (u \sin \omega t + v \cos \omega t) \cos \omega t.$$
(17)

Нас интересует эволюция системы с характерными скоростями порядка Δ или Ω , много меньшими ω . Поэтому в системе уравнений (17) можно заменить быстро осциллирующие тригонометрические функции их средними значениями. Таким образом получается следующий вид системы уравнений Блоха для вращающихся компонент вблизи резонанса:

$$\dot{\boldsymbol{U}} = -\Delta \boldsymbol{V}, \quad \dot{\boldsymbol{V}} = \Delta \boldsymbol{U} + \Omega \boldsymbol{W}, \quad \dot{\boldsymbol{W}} = -\Omega \boldsymbol{V}.$$
 (18)

Эта автономная система третьего порядка имеет два интеграла движения. Первый из них,

$$J_1 = u^2 + v^2 + w^2 \equiv S^2 = 1,$$
 (19)

указывает, что несмотря на сделанные при выводе (18) приближения, состояние системы по-прежнему описывается точкой на поверхности сферы единичного радиуса. Второй интеграл движения,

$$J_2 = \Omega \boldsymbol{u} - \Delta \boldsymbol{w} \,, \tag{20}$$

задает уравнение плоскости, секущей сферу Блоха. Таким образом, конец вектора Блоха системы в гармоническом поле будет описывать окружность на поверхности сферы Блоха.

• Использование интегралов позволяет найти решения системы (18). Для изучавшихся ранее начальных условий, соответствующих системе в состоянии $|1\rangle$ до начала действия поля (u(0) = v(0) = 0, w(0) = 1), решение имеет вид

$$u(t) = -\frac{\Delta\Omega}{\Omega_{+}^{2}} (1 - \cos\Omega_{+}t), \quad v(t) = \frac{\Omega}{\Omega_{+}} \sin\Omega_{+}t,$$

$$w(t) = \frac{\Delta^{2} + \Omega^{2} \cos\Omega_{+}t}{\Omega_{+}^{2}}$$
(21)

При точном резонансе ($\Delta = 0$) вектор Блоха всегда находится в плоскости *OVW*.

§ 10.3 Сдвиг Блоха - Зигерта

◆ Усреднение системы (17) и переход к форме (18) эквивалентны использованию приближения вращающегося поля (§ 10.1). Точная система уравнений (30) позволяет отыскать поправки к решениям этого приближения. Перепишем полную систему в виде

$$\dot{u} = -\Delta v + \Omega w \sin 2\omega t,$$

$$\dot{v} = \Delta u + \Omega w + \Omega w \cos 2\omega t,$$

$$\dot{w} = -\Omega v - \Omega u \sin 2\omega t - \Omega v \cos 2\omega t.$$
(22)

Пусть U_0, V_0 и W_0 - решения усредненной системы. Положим $W = W_0 + W_1$. Тогда для поправки W_1 получаем уравнение

$$\dot{W}_1 = -\Omega U_0 \sin 2\omega t - \Omega V_0 \cos 2\omega t \,. \tag{23}$$

Переменные *U*₀ и *V*₀ изменяются медленно. Проинтегрируем уравнение (36), считая их константами: тогда

$$W_1(t) \approx \frac{\Omega}{2\omega} U_0 \cos 2\omega t - \frac{\Omega}{2\omega} V_0 \sin 2\omega t$$
. (24)

Подставляя это выражение в первые два уравнения системы (22), после усреднения по быстрым осцилляциям поля получаем

$$\dot{\boldsymbol{u}} = -\left(\Delta + \frac{\Omega^2}{4\omega}\right)\boldsymbol{v}, \quad \dot{\boldsymbol{v}} = \left(\Delta + \frac{\Omega^2}{4\omega}\right)\boldsymbol{u} + \Omega\boldsymbol{w}.$$
 (25)

Из сравнения с системой (18) видно, что учет влияния быстро осциллирующих членов эквивалентен увеличению частоты перехода (а с ней и расстройки) на величину δ ,

$$\delta = \frac{\Omega^2}{4\omega},\tag{26}$$

которая называется сдвигом Блоха - Зигерта.

★ В стандартных условиях сдвиг Блоха - Зигерта $\delta = 6.85 \cdot 10^8 c^{-1}$ примерно в 3200 раз меньше частоты Раби.

§ 10.4 Рассеяние на двухуровневой системе: простейшая модель

• Если матричный элемент дипольного момента между состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ действителен, $\vec{d}_2 = 0$, то зависимость дипольного момента двухуровневой системы от времени пропорциональна компоненте *P* вектора Блоха. Выражая *P* через компоненты *U* и *V* во вращающейся системе координат, имеем

$$P = U\cos\omega t - V\sin\omega t \,. \tag{27}$$

Используем найденное выше решение (21), соответствующее начальным условиям, в которых до начала действия поля система находилась в основном состоянии. Элементарные расчеты дают

$$P = -\frac{\Delta\Omega}{\Omega_+^2}\cos\omega t + \Omega\frac{\Omega_+ + \Delta}{2\Omega_+^2}\cos(\omega + \Omega_+)t - \Omega\frac{\Omega_+ - \Delta}{2\Omega_+^2}\cos(\omega - \Omega_+)t.$$

Под действием гармонического поля двухуровневая система излучает как на частоте внешнего поля ω , так и на боковых частотах $\omega \pm \Omega_+$, где $\Omega_+ = \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}$ есть частота осцилляций компонент вектора Блоха во вращающейся системе координат.

Пренебрегая малыми величинами порядка Δ/ω и Ω/ω , получим выражение для полной мощности излучения:

$$\mathbf{P} = \frac{2 < \ddot{\vec{d}}^2 >}{3c^3} \approx \frac{\vec{d}^2 \omega^4}{6c^3}.$$
 (29)

Соответствующее сечение рассеяния дается выражением

$$\sigma = \frac{\mathbf{P}}{I} = \frac{\vec{d}^2 \omega^4}{6Ic^3} \tag{30}$$

★ Для стандартного двухуровневого атома ($d_s = ea_0$) с резонансом на стандартной частоте ($\omega = \omega_s$) сечение рассеяния в стандартных условиях $\sigma_{2s} = 3.91 \cdot 10^{-22} cm^{-2}$. Оно примерно в 600 раз больше сечения рассеяния на свободном электроне (2.5).

Мощность излучения, рассеиваемого двухуровневой системой в гармоническом квазирезонансном поле, почти не зависит от амплитуды действующего на систему поля, а сечение рассеяния убывает обратно пропорционально интенсивности действующего на систему излучения.

Найти зависимость мощности излучения двухуровневой системы в гармоническом поле от расстройки Δ и амплитуды поля ~ Ω в резонансном случае ($\Delta \ll \Omega$) в первых неисчезающих порядках по Δ/ω и Ω/ω .

ИНТЕРЛЮДИЯ

А вы видели хоть один [атом]? Эрнст Мах

☆ Задача. Одиночный атом с резонансной частотой $\omega_{21} = 2\omega_s$ и матричным элементом перехода $d_{21} = ea_0$, находящийся в ловушке, облучается резонансным монохроматическим (зеленым) светом.

Звездой какой величины будет казаться этот атом наблюдателю с расстояния R = 10 см?

• Применимость выражения (30) ограничена со стороны слабых полей. Такое ограничение связано с тем, что при построении модели не была учтено *спонтанное излучение* системы, находящейся в возбужденном состоянии. Пренебрежение этим процессом оправдано, если частота Раби Ω велика по сравнению со скоростью спонтанного излучения

$$\Gamma_s = \frac{4\vec{d}^2\omega^3}{3\hbar c^3}.$$
(31)

Приравнивая Ω и Γ_s , находим нижнюю границу применимости выражения (20) по напряженности поля: $\mathscr{E}_{-} = 4d\omega^3/3c^3$. В стандартных условиях $\mathscr{E}_{-} = 6.95 \cdot 10^{-4} \Gamma c$, что соответствует интенсивности излучения $I_{-} = 5.77 \cdot 10^{-5} Bm \ cm^{-2}$. На нижней границе применимости сечение рассеяния излучения на двухуровневой системе максимально и равно

$$\sigma_{2-} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{c}{\omega}\right)^2 = \frac{4\pi}{3} \alpha^{-2} \eta^{-2} a_0^2.$$
(32)

Как и следовало ожидать, оно (параметрически) равно квадрату длины волны излучения - максимальной величине сечения рассеяния волны на точечном объекте [ЛЛIII, §§123, 133].

• Применимость выражения (30) ограничена со стороны сильных полей. Такое ограничение связано с тем, что при решении было использовано приближение вращающегося поля, предполагавшее малость параметра $\beta_+ = \Omega/\omega_{21}$ (3). Приравнивая этот параметр единице, найдем верхнюю границу применимости выражения (30) по напряженности поля. В стандартных условиях она равна $\mathcal{E}_+ = 7.32 \cdot 10^5 \Gamma c$, что соответствует интенсивности $I_+ = 6.4 \cdot 10^{13} Bm cm^{-2}$. На верхней границе применимости сечение рассеяния излучения на двухуровневой системе минимально и равно

$$\sigma_{2+} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{d^4 \omega^2}{\hbar^2 c^4} = \frac{4\pi}{3} \alpha^4 \eta^2 a_0^2.$$
(33)

Оно имеет тот же порядок по α , что и сечения нерезонансного рассеяния излучения на атоме (2.4) и рассеяния на свободном электроне (2.5), отличаясь от них степенью частотного фактора η .

EOL 🔍

8
TEST #05

§ 11.1 Резонансная кубичная поляризуемость двухуровневой системы

◆ Полученные в предыдущем параграфе (§10.4) результаты показывают, что спектр излучения двухуровневой системы сосредоточен вблизи частоты ∞ действующего на систему поля. Возникает вопрос – имеются ли в спектре частоты, близкие к гармоникам поля?

Приближение вращающегося поля (ПВП) дает отрицательный ответ на этот вопрос, поскольку в его системе уравнений для амплитуд отброшены антирезонансные члены, ответственные за генерацию гармоник.

Для описания генерации гармоник для случая слабого поля $(\beta = \Omega/\Delta \ll 1)$ можно вернуться к системе

$$i\hbar \frac{db}{dt} = \frac{a}{2} \left[V e^{i(\omega_{21} + \omega)t} + V^* e^{i(\omega_{21} - \omega)t} \right],$$

$$i\hbar \frac{da}{dt} = \frac{b}{2} \left[V e^{-i(\omega_{21} - \omega)t} + V^* e^{-i(\omega_{21} + \omega)t} \right].$$
(1)=(10.2)

и решать ее по теории возмущений, используя стандартные начальные условия a(0) = 1, b(0) = 0. Сразу же видно, что квадратичная восприимчивость в модели ДУС обратится в ноль: формула

$$\chi_{2}(\omega) = \frac{e^{3}}{2\hbar^{2}} \sum_{m,k} x_{nm} x_{mk} x_{kn} R_{nmk}(\omega), \qquad (2) \equiv (8.7)$$

показывает, что для отличия восприимчивости от нуля необходимо наличие замкнутой петли из трех (ненулевых) матричных элементов, которую из матричных элементов x_{12} и x_{21} построить невозможно. Остается, впрочем, возможность ненулевой кубичной поляризуемости системы (как и высших нечетных поляризуемостей).

Однако применение теории возмущений не позволит рассмотреть самый интересный случай генерации гармоник в резонансном поле $(\beta = \Omega/\Delta \gg 1)$.

• Обратимся к этому случаю, ограничившись точным резонансом $(\Delta = 0)$. Начнем с системы уравнений

$$\dot{u} = -\Delta v + \Omega w \sin 2\omega t,$$

$$\dot{v} = \Delta u + \Omega w + \Omega w \cos 2\omega t,$$

$$\dot{w} = -\Omega v - \Omega u \sin 2\omega t - \Omega v \cos 2\omega t$$

(3)=(10.22)

с начальными условиями U(0) = V(0) = 0, W(0) = 1. Тогда решения нулевого приближения, пренебрегающего осциллирующими членами и эквивалентного ПВП, имеют вид:

$$u_0 = 0, \quad v_0 = \sin \Omega t, \quad w_0 = \cos \Omega t.$$
(4)

Представив уточненные решения в виде $U = U_0 + U_1$ и $V = V_0 + V_1$ и подставив их в первые два уравнения системы (3), для поправок первого порядка получим уравнения

$$\dot{u}_1 = \Omega W_0 \sin 2\omega t, \quad \dot{v}_1 = \Omega W_0 \cos 2\omega t, \quad (5)$$

которые элементарно интегрируются: с учетом нулевых начальных условий для поправок получаем (6)

$$u_{1} = \frac{2\Omega\omega - \Omega^{2}}{2\left(\Omega^{2} - 4\omega^{2}\right)} \left\{ \cos\left(2\omega + \Omega\right)t - 1 \right\} + \frac{2\Omega\omega + \Omega^{2}}{2\left(\Omega^{2} - 4\omega^{2}\right)} \left\{ \cos\left(2\omega - \Omega\right)t - 1 \right\},$$

$$v_{1} = \frac{2\Omega\omega - \Omega^{2}}{2\left(\Omega^{2} - 4\omega^{2}\right)} \sin\left(2\omega + \Omega\right)t - \frac{2\Omega\omega + \Omega^{2}}{2\left(\Omega^{2} - 4\omega^{2}\right)} \sin\left(2\omega - \Omega\right)t \quad (7)$$

Поправка к поляризации системы (см. (10.27)),

$$P_1 = U_1 \cos \omega t - V_1 \sin \omega t , \qquad (8)$$

в этом случае принимает вид

$$P_1 = \frac{1}{\Omega^2 - \omega^2} \Big[\Omega^2 \sin \Omega t \sin \omega t - 2\Omega \omega \cos \omega t + 2\Omega \omega \cos \Omega t \cos \omega t \Big].$$
(9)

Очевидно, она имеет фурье-компоненты только вблизи основной частоты поля.

• Продолжим расчет. Полагая $W = W_0 + W_1$, для первой поправки к продольной компоненте вектора Блоха находим (10)

$$W_1 = -\frac{2\Omega\omega - \Omega^2}{2(\Omega^2 - 4\omega^2)} \left\{ \cos(2\omega + \Omega)t - 1 \right\} + \frac{2\Omega\omega + \Omega^2}{2(\Omega^2 - 4\omega^2)} \left\{ \cos(2\omega - \Omega)t - 1 \right\}$$

Это выражение позволяет вычислить поправки второго порядка U_2 и V_2 . Они содержат в спектре частоты 2ω , $2\omega \pm \Omega$, $4\omega \pm \Omega$ и Ω и дают вклад в поляризацию в окрестности частоты третьей гармоники. Этот вклад имеет вид

$$P_{2} = \frac{\Omega^{2}\omega}{2(\Omega + 2\omega)^{2}(\Omega + 4\omega)} \cos(3\omega + \Omega)t - \frac{\Omega^{3}}{4\omega(\Omega^{2} - 4\omega^{2})} \cos 3\omega t + \frac{\Omega^{2}\omega}{2(\Omega - 2\omega)^{2}(\Omega - 4\omega)} \cos(3\omega - \Omega)t.$$
(11)

Спектр излучения двухуровневой системы в резонансном поле вблизи частоты третьей гармоники представляет собой триплет с частотами 3ω , $3\omega \pm \Omega$. Удивительной чертой решения является поведение амплитуд боковых компонент триплета: они растут пропорционально не кубу (как надо было ожидать на основе теории возмущений – см. §8.5 – и как ведет себя амплитуда центральной компоненты), а квадрату амплитуды поля.

§ 11.2 Рассеяние сильного поля на двухуровневой системе

• Рассчитанное в приближении вращающегося поля сечение рассеяния резонансного излучения на двухуровневой системе убывает с ростом интенсивности, достигая на верхней границе применимости приближения $(I \sim I_+)$ значения порядка сечения нерезонансного рассеяния. Рассмотрим процессы рассеяния в полях с интенсивностью $I \gg I_+$. Поскольку $\Omega \ge \omega_{21}$, переход во вращающуюся систему координат нецелесообразен. Уравнения для исходных компонент вектора Блоха имеют вид

$$\frac{dP}{dt} = -\omega_{21}Q, \quad \frac{dQ}{dt} = \omega_{21}P - 2\Omega R\cos\omega t, \quad \frac{dR}{dt} = 2\Omega Q\cos\omega t.$$
(12)

Если $\Omega \gg \omega_{21}$, то в правых частях можно сохранить только члены, пропорциональные Ω . Остаются два уравнения,

$$\frac{dQ}{dt} = -2\Omega R \cos\omega t, \quad \frac{dR}{dt} = 2\Omega Q \cos\omega t, \quad (13)$$

обладающие первым интегралом $J_1 = Q^2 + R^2 \cong 1$. Подстановка $Q = \sin \phi(t), R = \cos \phi(t)$ приводит к одному уравнению первого порядка

$$\frac{d\phi}{dt} = -2\Omega\cos\omega t \,. \tag{14}$$

Возьмем начальные условия Q(0) = 0, R(0) = -1. Тогда

$$Q(t) = \sin\left(\frac{2\Omega}{\omega}\sin\omega t\right), R(t) = -\cos\left(\frac{2\Omega}{\omega}\sin\omega t\right).$$
(15)

☆ Задача. Исследовать условия применимости решения (15) и найти к нему первую поправку.

Периодическую функцию Q(t) можно разложить в ряд Фурье. Коэффициенты фурье-разложения будут выражаться через функции Бесселя первого рода $J_m(z)$ с нечетными индексами *m* от аргумента $z = 2\Omega/\omega$:

L11

$$Q(t) = 2\sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}\left(\frac{2\Omega}{\omega}\right)\sin(2n+1)\omega t.$$
 (16)

• Найденное решение содержит только нечетные гармоники частоты действующего поля, что связано со специальным выбором начальных условий. При начальных условиях общего вида в спектре Q(t) будут присутствовать как нечетные, так и четные гармоники частоты действующего поля.

• Амплитуда дипольного момента системы определится из первого уравнения системы (12):

$$P(t) = 2 \frac{\omega_{21}}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}\left(\frac{2\Omega}{\omega}\right) \frac{\cos(2n+1)\omega t}{(2n+1)}.$$
 (17)

Средняя мощность излучения есть

$$\mathbf{P} = \frac{2d^2}{3c^3} \overline{P}^2 = \frac{4d^2 \omega_{21}^2 \omega^2}{3c^3} \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}^2 \left(\frac{2\Omega}{\omega}\right) \cdot (2n+1)^2.$$
(18)

Оценим входящую в выражение для мощности Р сумму,

$$S_u(z) = \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}^2(z) \cdot (2n+1)^2, \qquad (19)$$

при больших значениях аргумента ($z \gg 1$). Асимптотики функций Бесселя имеют вид

$$J_n(z) \approx \frac{z^n}{2^n n!} (|z| \le 1), \qquad (20)$$

$$J_n(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \left(|z| \gg 1, n\right).$$
(21)



График функции $J_{10}(z)$ и ее асимптотик (20) (штриховая линия) и (21) (пунктирная линия)

Основной вклад в сумму дают слагаемые с $n \le z/2$. Это означает, что практически в излучении представлены только гармоники с номерами, не превосходящими $2\beta_+ = 2\Omega/\omega$ - параметр $2\beta_+$ определяет максималь-

ную степень многоквантовости процесса генерации гармоник. Используя в этой области асимптотику (21), получаем

$$S_u(z) \approx \frac{2}{\pi z} \sum_{n=0}^{z/2} (2n+1)^2 \approx \frac{z^2}{3\pi}.$$
 (22)

★ Полученная оценка дает для отношения $S_u(z)/z^2$ в пределе больших *z* постоянное значение $(3\pi)^{-1} = 0.106$. Численные расчеты дают для этой константы значение 0.125.

С учетом формулы (22) находим, что полная мощность излучения,

$$\mathbf{P} \approx \frac{16d^2 \omega_{21}^2 \Omega^2}{9\pi c^3},\tag{23}$$

растет пропорционально интенсивности действующего излучения. Сечение полного рассеяния сильного поля на двухуровневой системе, учитывающее все излучаемые гармоники,

$$\sigma \approx \frac{128}{9} \alpha^4 a_0^2 \left(\frac{\omega_{21}}{\omega_a}\right)^2, \tag{24}$$

не зависит от интенсивности и имеет приблизительно ту же величину, что и сечение нерезонансного рассеяния.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #12 КВАЗИЭНЕРГИЯ ТРЕХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

§ 12.1 Квазиэнергия

• Если гамильтониан квантовой системы зависит от времени периодически с периодом T, $\hat{H}(t) = \hat{H}(t+T)$, то у нестационарного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi \tag{1}$$

существует (.) полная система решений $\psi_n(\vec{r},t)$, представляющих собой произведения периодических по времени с периодом *T* функций, $\phi_n(\vec{r},t) = \phi_n(\vec{r},t+T)$, на экспоненты с мнимыми показателями, линейно зависящими от времени:

$$\psi_n(\vec{r},t) = \varphi_n(\vec{r},t) \exp\left(-i\frac{\widetilde{E}_n}{\hbar}t\right).$$
(2)

Такие состояния называются *квазиэнергетическими* (КЭС), а величина \tilde{E}_n , входящая в показатель экспоненты, называется *квазиэнергией*.

★ Отметим аналогию между приведенным утверждением и *теоремой Блоха* [ЛЛІХ, §55] для систем с гамильтонианами, периодически зависящими от пространственных координат: $\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \vec{a})$.

★ Становление концепции квазиэнергии и ее связь с другими методами рассмотрены в [<u>3</u>75]. В настоящее время КЭС чаще называются *одетыми состояниями* (dressed states); изредка для них используется термин «состояния Флоке».

[<u>3</u>75] Я. Б. Зельдович

Рассеяние и излучение квантовой системой в сильной электромагнитной волне УФН, 1973, т.110, вып. 1, сс. 139 - 151

• Для системы с периодическим по времени гамильтонианом $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V} \cos \omega t$ при начальных условиях $a_k(0) = \delta_{kn}$ в первом порядке теории возмущений получается выражение для ВФ

$$\Psi^{(1)} = e^{-i\omega_n t} \varphi_n - \sum_k \frac{V_{kn}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t}}{\omega_{kn} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t}}{\omega_{kn} + \omega} \right] e^{-i\omega_k t} \varphi_k.$$
(3)

Его можно представить в виде ВФ квазиэнергетического состояния:

$$\Psi^{(1)} = e^{-i\omega_n t} \left\{ \varphi_n - \sum_k \frac{V_{kn}}{2\hbar} \left[\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{kn} - \omega} + \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{kn} + \omega} \right] \varphi_k \right\}.$$
(4)

При этом квазиэнергия этого КЭС совпадает с энергией начального состояния:

$$\widetilde{E}_n = E_n. \tag{5}$$

Можно убедиться, что переход к высшим порядкам теории возмущений не изменит этого вывода. Нетривиальная зависимость $\tilde{E}_n(V)$ возможна только при расчете за рамками приближений ТВ конечного порядка. Пример такой зависимости может быть взят в модели двухуровневой системы.

§ 12.2 Квазиэнергия двухуровневой системы

• В соответствии с результатами §10.1 (ф-ла (10.8)), для ДУС в гармоническом поле частоты ω общее решение для амплитуды a(t) имеет вид

$$a(t) = a_1 e^{irt} + a_2 e^{ist}, \qquad (6)$$

где $\Delta = \omega_{21} - \omega$ - расстройка и введены обозначения

$$r = \frac{\Delta - \Omega_+}{2}, \quad s = \frac{\Delta + \Omega_+}{2}.$$
 (7)

Подставив это решение в первое уравнение системы (10.4),

$$i\frac{da}{dt} = b\frac{\Omega}{2}e^{-i\Delta t},\qquad(8) \equiv (10.4)$$

найдем общее решение для амплитуды b(t):

$$b(t) = a_1 \frac{2r}{\Omega} e^{ist} + a_2 \frac{2s}{\Omega} e^{irt}.$$
(9)

Теперь общий вид ВФ может быть записан в виде

(10)

$$\Psi(t) = \alpha_1 e^{-i(\omega_1 + r)t} \left(\varphi_1 + \frac{2r}{\Omega} \varphi_2 e^{-i\omega t} \right) + \alpha_2 e^{-i(\omega_2 - r)t} \left(-\frac{2r}{\Omega} \varphi_1 e^{i\omega t} + \varphi_2 \right),$$

где

$$\alpha_1 = a_1, \quad \alpha_2 = -a_2 \frac{2r}{\Omega}.$$
 (11)

Итак, общее решение уравнений движения для вектора состояния двухуровневой системы в приближении вращающегося поля может быть представлено как суперпозиция двух квазиэнергетических состояний

$$\Phi_{1} = e^{-i(\omega_{1}+r)t} \left(\varphi_{1} + \frac{2r}{\Omega} \varphi_{2} e^{-i\omega t} \right),$$

$$\Phi_{2} = e^{-i(\omega_{2}-r)t} \left(-\frac{2r}{\Omega} \varphi_{1} e^{i\omega t} + \varphi_{2} \right)$$
(12)

с квазиэнергиями

$$\tilde{E}_1 = E_1 - \hbar \left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} - \Delta}{2} \right), \tilde{E}_2 = E_2 + \hbar \left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} - \Delta}{2} \right)$$
(13)



Коэффициенты в Φ_1 и Φ_2 выбраны так, чтобы при уменьшении амплитуды поля, $\Omega \to 0$, эти КЭС переходили в ВФ стационарных состояний. Зависимость квазиэнергий от частоты Раби повторяет хорошо известную зависимость положения энергетических уровней в двухуровневой системе от недиагонального матричного элемента постоянного (по времени) возмущения.

• Если система находится в КЭС, то спектр ее излучения содержит только частоту действующего поля и ее гармоники. Если система находится в суперпозиции КЭС с разными квазиэнергиями \tilde{E}_n , то спектр ее излучения содержит в общем случае частоты из набора

$$k\omega \pm \frac{1}{\hbar} \left(\widetilde{E}_i - \widetilde{E}_j \right). \tag{14}$$

Это выражение можно интерпретировать как набор частот переходов между КЭС с учетом неоднозначности определения квазиэнергий.

• Собирая вместе утверждения (5) и (14), мы должны заключить, что в слабом внешнем поле (в рамках применимости теории возмущений) двухуровневая система должна излучать не только на частоте внешнего поля ω и ее гармониках, но также и на собственной частоте перехода системы ω_{21} . Однако наши предыдущие расчеты такого излучения не описывали. Дело в использованном выше специальном выборе ВФ на-

чального состояния (2.25). Если в качестве начального состояния взять суперпозицию ВФ двух уровней,

'10

$$\Psi = a e^{-i\omega_1 t} \varphi_1(\vec{r}) + b e^{-i\omega_2 t} \varphi_2(\vec{r}), \qquad (15)$$

то и в отсутствие внешнего поля система будет обладать переменным дипольным моментом

$$\vec{d}(t) = \vec{d}_1 \left(a^* b e^{-i\omega_{2l}t} + a b^* e^{i\omega_{2l}t} \right)$$
(16)

Это выражение соответствует излучению на частоте перехода ω_{21} с мощностью

$$\mathbf{P}_{s} \approx \frac{4}{3} \omega_{21}^{4} \frac{\vec{d}^{2}}{c^{3}} |a|^{2} |b|^{2}$$
(17)

Излучение системы в отсутствие переменных внешних полей есть, по определению, *спонтанное излучение*, и формула (17) дает полуклассическое его описание.

§ 12.3 Трехуровневая система Когерентное пленение населенностей

• Усечение системы уравнений для амплитуд (2.22) до конечного числа состояний, большего двух, приводит к моделям многоуровневых систем, которые исследуются теми же методами, что и двухуровневая система. Простейшей из них является трехуровневая система. В силу правила отбора по четности, разрешенными переходами могут быть связаны только две пары уровней из трех. В соответствии с расположением связанных уровней их принято классифицировать как модели Λ , V и Ξ типов (такое разделение существенно в теоретических подходах, учитывающих процессы релаксации).



Трехуровневая система под воздействием двух гармонических полей обладает свойством, резко отличающим ее от двухуровневой системы.
 Рассмотрим модель Λ - типа в бигармоническом внешнем поле,

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_1 \cos \omega_1 t + \vec{E}_2 \cos \omega_2 t, \qquad (18)$$

частоты компонент которого близки к частотам переходов ω_{31} и ω_{32} соответственно. Уравнения для трех амплитуд стационарных состояний $|1\rangle, |2\rangle$ и $|3\rangle$ могут быть записаны в виде

$$\dot{a}_{1} = i\Omega_{1}e^{i\Delta_{31}t}a_{3}$$

$$\dot{a}_{2} = i\Omega_{2}e^{i\Delta_{32}t}a_{3}$$

$$\dot{a}_{3} = i\Omega_{1}e^{-i\Delta_{31}t}a_{1} + i\Omega_{2}e^{-i\Delta_{32}t}a_{2}$$
(19)

где введены частоты Раби для разрешенных переходов

$$\Omega_1 = \frac{\vec{d}_{13}\vec{E}_1}{\hbar}, \quad \Omega_2 = \frac{\vec{d}_{23}\vec{E}_2}{\hbar}$$
(20)

(оператор взаимодействия $V = -\vec{d}\vec{E}(t)$) и расстройки

$$\Delta_{31} = \omega_1 - \omega_{31}, \quad \Delta_{32} = \omega_2 - \omega_{32}. \tag{21}$$

Уравнения (19) записаны в приближении вращающегося поля (§10.1); кроме того, отброшены члены с расстройками $\tilde{\Delta}_{31} = \omega_2 - \omega_{31}$, $\tilde{\Delta}_{32} = \omega_1 - \omega_{32}$, которые считаются большими. Если малые расстройки одинаковы,

$$\Delta_{31} = \Delta_{32} = \Delta, \qquad (22)$$

то экспоненты в первом и втором уравнениях (19) совпадают, и система имеет очевидный интеграл движения:

$$J = \Omega_2 a_1 - \Omega_1 a_2. \tag{23}$$

Наличие этого интеграла можно интерпретировать так: при условии (22) существует такая линейная комбинация нижних состояний

$$\Psi_{d} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{1}^{2} + \Omega_{2}^{2}}} \left(\Omega_{2} \left| 1 \right\rangle - \Omega_{1} \left| 2 \right\rangle \right), \tag{24}$$

что проекция на нее произвольного вектора состояния системы не меняется со временем (при любых значениях частот Раби). Такие состояния называются *темными* (dark states).

В нашем приближении часть амплитуды вероятностей, соответствующая проекции начального вектора на Ψ_d , просто не эволюционирует. При учете процессов релаксации (например, за счет спонтанного излучения) система из верхнего состояния $|3\rangle$ может перейти в темное состояние – но не может выйти из него под действием поля. С течением времени вся населенность системы сосредоточится в темном состоянии. Это явление называется когерентным пленением населенностей (coherent population trapping). Переменное поле (18) не сможет перевести систему в верхнее состояние $|3\rangle$ – атом не сможет поглощать или рассеивать фотоны. В зависимости интенсивности флуоресценции атома от расстройки одного из полей появится провал.



Когерентное пленение населенностей было теоретически предсказано в работе [АО76]

[AO76] E.Arimondo and G.Orriols

Nonabsorbing atomic coherences by coherent two-photon transitions in a three-level optical pumping

Lettere Al Nuovo Cimento, 1976, vol. 17, no. 10, pp. 333-338

и вскоре обнаружено в эксперименте [AG+76]

[AG+76] G. Alzetta, A. Gozzini, L. Moi and G. Orriols An experimental method for the observation of r.f. transitions and laser beat resonances in oriented Na vapour Il Nuovo Cimento B, 1976, vol. 36, no. 1, pp. 5-20.

Nuovo Cimento B, 1976, vol. 36, no. 1, pp. 5-20.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

◆ *Гармоническим осциллятором* (ГО) называется система с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}.$$
 (25)

Для квантовой модели удобно использовать осцилляторную систему единиц $m, \omega_0, \hbar \equiv 1$. В теории этой модели важную роль играют операто-

ры рождения и уничтожения, связанные с операторами координаты и импульса соотношениями

$$\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}), \qquad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}).$$
 (26)

имеющие коммутационное соотношение

$$\left[\hat{a},\,\hat{a}^+\right] = 1 \tag{27}$$

и матричные элементы в базисе стационарных состояний

$$\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.$$
 (28)

Далее будут рассмотрены некоторые задачи динамики гармонического осциллятора в переменном внешнем поле.

§ 12.4 Гармонический осциллятор Гейзенберговская картина

• Гармонический осциллятор в гармоническом (однородном) поле описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} - f\hat{x}\cos\omega t, \qquad (29)$$

где

$$f = \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{\hbar m\omega_0^3}} \tag{30}$$

есть величина амплитуды силы в осцилляторных единицах.

Расчет отклика ГО на гармоническое поле удобно проводить в гейзенберговской картине, используя операторы, зависящие от времени. Гамильтониан (29) может быть выражен через операторы рождения и уничтожения так:

$$\hat{H} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} - \frac{f}{\sqrt{2}}(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a})\cos\omega t.$$
 (31)

Гейзенберговское уравнение движения для оператора уничтожения $\hat{a}(t)$ имеет вид

$$i\frac{d\hat{a}}{dt} = \hat{a} - \frac{f}{\sqrt{2}}\cos\omega t \tag{32}$$

Решение этого уравнения с начальным условием $\hat{a}(0) = \hat{a}_0$ есть

$$\hat{a}(t) = \left[\hat{a}_0 + \delta(t)\right] e^{-it}, \qquad (33)$$

где $\delta(t)$ есть числовая функция времени

$$\delta(t) = i \frac{f}{\sqrt{2}} \int_{0}^{t} e^{it'} \cos\omega t' dt'.$$
(34)

В нерезонансном случае ($\omega \neq 1$) элементарное интегрирование дает ответ:

$$\hat{a}(t) = \hat{a}_0 e^{-it} + \frac{f}{2\sqrt{2}} \left[\frac{e^{i\omega t} - e^{-it}}{1 + \omega} + \frac{e^{-i\omega t} - e^{-it}}{1 - \omega} \right].$$
 (35)

Выражение для $\hat{a}^{+}(t)$ получается эрмитовым сопряжением. Для гейзенберговского оператора координаты $\hat{x}(t)$ получаем

$$\hat{x}(t) = \hat{x}_0 \cos t + \hat{p}_0 \sin t + \frac{f}{1 - \omega^2} (\cos \omega t - \cos t).$$
(36)

При внезапном включении поля отклик ГО содержит две компоненты равных амплитуд с частотами собственных колебаний $\omega_0 \equiv 1$ и вынуждающего поля ω . Средний дипольный момент на частоте ω у системы, находящейся под действием поля, имеет один и тот же вид для всех начальных состояний осциллятора:

$$d(t) = \frac{ef}{1 - \omega^2} \cos \omega t = \frac{e^2 \mathscr{E}}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t.$$
(37)

Если поле включается адиабатически, то весь отклик описывается этим выражением для d(t). Выражение для линейной поляризуемости гармонического осциллятора,

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2},$$
(38)

формально совпадает с выражением, найденным по теории возмущений (§6.1), но применимо без ограничений на величину поля.

Задача. Приведенные расчеты относились к нерезонансному случаю, $\omega \neq \omega_0$. Исследовать отклик гармонического осциллятора в условиях точного резонанса, $\omega = \omega_0$.

§ 12.5 Гармонический осциллятор Шредингеровская картина – решение Хусими

◆ Для гармонического осциллятора в однородном поле, произвольным образом зависящем от времени, может быть найдено выражение для ВФ в любой момент времени. Оно впервые было получено К. Хусими [H53].

[H53] Kôdi Husimi
 Miscellanea in Elementary Quantum Mechanics, II
 Prog. Theor. Phys., 1953, vol. 9, no. 4, pp. 381-402

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \left[\frac{x^2}{2} - f(t)x\right]\Psi.$$
 (39)

Будем искать его решение в виде

$$\psi(x,t) = \varphi(y,t) \exp i(\dot{\eta}y + \sigma), \qquad (40)$$

где $y = x - \eta(t)$, а $\eta(t)$ и $\sigma(t)$ суть некоторые функции времени, вид которых определится позже. Подстановкой (40) в УШ получаем уравнение для функции $\phi(y,t)$:

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{y^2}{2} \varphi +$$

$$+ y\varphi(\ddot{\eta} + \eta - f(t)) + \varphi\left(\dot{\sigma} - \frac{1}{2}\dot{\eta}^2 + \frac{1}{2}\eta^2 - f(t)\eta\right).$$
(41)

Выберем $\eta(t)$ и $\sigma(t)$, потребовав, чтобы выражения в скобках в двух последних членах обратились в ноль. Это условие определит уравнения для η и σ :

$$\ddot{\eta} + \eta = f(t), \tag{42}$$

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{2}\dot{\eta}^2 - \frac{1}{2}\eta^2 + f(t)\eta$$
(43)

При выбранном условии уравнение для $\varphi(y,t)$ примет вид уравнения Шредингера для невозмущенного ГО. Если в начальный момент ГО находился в одном из стационарных состояний φ_n , то под действием однородного внешнего поля его ВФ $\varphi_n(x)$ не изменит форму, но будет двигаться "как целое" по закону $\varphi_n(x - \eta(t))$. Положение величины смещения $\eta(t)$ будет изменяться по закону, который определяется уравнением (42) и совпадает с классическим законом движения возмущенного гармонического осциллятора.

• Обратимся к величине
$$\sigma(t)$$
. Величина в правой части уравнения (44),
 $\dot{\sigma} = \frac{1}{2}\dot{\eta}^2 - \frac{1}{2}\eta^2 + f(t)\eta = T - U = L(\eta, \dot{\eta}, t),$ (44)

есть функция Лагранжа для возмущенного ГО. Таким образом, величина $\sigma(t)$ есть (гамильтоново) действие [ЛЛІ, §2]:

$$\sigma(t) = \int_{0}^{t} L(t')dt' = S(t).$$
(45)

Теперь решение Хусими для начальных условий $\psi(x,0) = \varphi_n(x)$ может быть записано в виде

$$\Psi(x,t) = \varphi_n(x-\eta) \exp \left[-\left(n+\frac{1}{2}\right)t + \dot{\eta}(x-\eta) + \int_0^t L(t')dt'\right].$$
 (46)

По определению КЭС (§12.1), их волновые функции имеют форму

$$\psi_n(\vec{r},t) = \varphi_n(\vec{r},t) \exp\left(-i\frac{\widetilde{E}_n}{\hbar}t\right).$$
(47)

где $\varphi_n(\vec{r},t) = \varphi_n(\vec{r},t+T)$. Таким образом, если действующая на гармонический осциллятор сила f(t) является периодической, то решение Хусими (46) определяет волновую функцию квазиэнергетического состояния гармонического осциллятора.

Для гармонического осциллятора, находящегося в периодически изменяющемся поле, существует система КЭС, пространственные части которых пропорциональны ВФ стационарных состояний ГО φ_n со сдвинутым началом координат, а величина квазиэнергии \widetilde{E}_n отличается от энергии E_n на величину, равную среднему по периоду поля значению функции Лагранжа с обратным знаком.

★ Эти утверждения справедливы, если период действующего на осциллятор поля не совпадает с периодом собственных колебаний $T = 2\pi/\omega_0$.

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #13 ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР - 2 СЛАБО НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

TEST #06

§ 13.1 Квазиэнергия гармонического осциллятора

• Используя вывод предыдущего параграфа, вычислим квазиэнергию гармонического осциллятора в гармоническом поле $f(t) = f \cos \omega t$. В расчетах будем пользоваться обозначением ω_0 для собственной частоты осциллятора. Из уравнения

$$\ddot{\eta} + \eta = f(t), \qquad (1) \equiv (12.42)$$

получаем

$$\eta = \frac{f \cos \omega t}{\omega_0^2 - \omega^2}, \qquad \dot{\eta} = -\frac{f \omega \sin \omega t}{\omega_0^2 - \omega^2}.$$
 (2)

Функция Лагранжа системы дается выражением

$$L(t) = \frac{f^2 \omega^2 \sin^2 \omega t}{2(\omega_0^2 - \omega^2)^2} - \frac{f^2 \omega_0^2 \cos^2 \omega t}{2(\omega_0^2 - \omega^2)^2} + \frac{f^2 \cos^2 \omega t}{\omega_0^2 - \omega^2}.$$
 (3)

Усредняя ее по времени и меняя знак, получим выражение для величины квазиэнергетического сдвига гармонического осциллятора в однородном гармоническом поле:

$$\Delta \widetilde{E} = -\frac{f^2}{4(\omega_0^2 - \omega^2)}.$$
(4)

• Рассмотрим предельные случаи этого выражения. В низкочастотном (адиабатическом) пределе $\omega \to 0$ минимум потенциальной энергии имеет в данный момент времени величину

$$\Delta U = -\frac{f^2(t)}{2\omega_0^2}.$$
(5)

Квазиэнергетический сдвиг равен среднему за период значению понижения минимума потенциальной энергии,

$$\Delta \widetilde{E} = \overline{\Delta U} = -\frac{f^2}{2\omega_0^2} \overline{\cos^2 \omega t} = -\frac{f^2}{4\omega_0^2}.$$
 (6)

В высокочастотном пределе $\omega \to \infty$ гармонический осциллятор эквивалентен свободной частице. Величина квазиэнергетического сдвига

$$\Delta \widetilde{E} = \frac{f^2}{4\omega^2} \tag{7}$$

равна средней кинетической энергии осцилляций свободного электрона в однородном гармоническом поле. Эта величина не содержит \hbar и может быть найдена классически. Рассмотрим (классическую) модель свободного электрона в однородном гармоническом поле, $m\ddot{x} = e\xi \cos \omega t$. Скорость электрона дается выражением

$$\dot{x} = v_0 + \frac{e\mathcal{E}}{m\omega}\sin\omega t \,. \tag{8}$$

Среднее значение кинетической энергии равно

$$\overline{T} = \frac{\overline{m\dot{x}^2}}{2} = \frac{mv_0^2}{2} + \frac{\overline{e^2\mathcal{E}^2}}{2m\omega^2}\sin^2\omega t = \overline{T}_0 + \Delta \widetilde{E}.$$
(9)

Таким образом, воздействие внешнего поля добавляет к кинетической энергии поступательного движения свободного электрона величину $\Delta \tilde{E} = e^2 \mathcal{E}^2 / 4m\omega^2$.

★ В стандартных условиях величина зависящей от поля добавки мала по сравнению с энергией кванта: $\Delta \tilde{E} = 1.69 \cdot 10^{-17} _{3p2} = 9.85 \cdot 10^{-6} \hbar \omega_s$. Оценим интенсивность I_q излучения стандартной частоты, при которой сдвиг средней кинетической энергии, вызванный полем, равен энергии кванта: $\Delta \tilde{E} = \hbar \omega_s$. Из уравнения $e^2 \mathcal{E}^2 / 4m \omega_s^2 = \hbar \omega_s$ получаем $I_a = mc \hbar \omega_s^3 / 2\pi e^2 = 1.1 \cdot 10^{13} Bm cm^{-2}$.

★ При рассмотрении многофотонной ионизации в сильных полях в §9.1 отмечалось, что учет пространственной зависимости поля приводит к эффективному понижению границы непрерывного спектра. Наличие добавки $\Delta \tilde{E}$ приводит к эффективному повышению границы непрерывного спектра. Какой из этих эффектов более важен?

§13.2 Гармонический осциллятор, когерентные состояния и внешнее поле

 Когерентными состояниями |α⟩ гармонического осциллятора называются собственные состояния оператора уничтожения:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$
 (10)

Параметр α в общем случае комплексен. Разложение вектора $|\alpha\rangle$ по стационарным состояниям гармонического осциллятора $|n\rangle$ имеет вид

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$
(11)

Из этой формулы видно, что когерентное в некоторый момент состояние остается таковым всегда:

$$|\alpha(t)\rangle = |\alpha(0)\exp(-i\omega_0 t)\rangle.$$
 (12)

• Пусть гармонический осциллятор при t = 0 находился в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$.

★ Отметим важный частный случай: когерентное состояние $|\alpha = 0\rangle$ является также основным стационарным состоянием $|n = 0\rangle$.

Рассмотрим эволюцию такого состояния при включении в момент t = 0 гармонического поля $\hat{V}(t) = -f\hat{x}\cos\omega t$. Из решения уравнения движения для оператора уничтожения в §12.4 непосредственно следует, что осциллятор, находившийся в начальный момент времени в когерентном состоянии $|\alpha(0)\rangle$, будет переходить в другие когерентные состояния с параметром

$$\alpha(t) = \alpha(0)e^{-it} + \frac{f}{2\sqrt{2}} \left[\frac{e^{i\omega t} - e^{-it}}{1 + \omega} + \frac{e^{-i\omega t} - e^{-it}}{1 - \omega} \right].$$
 (13)

Например, если $\alpha(0) = 0$, а $f \gg |1 - \omega| \ll 1$, то осциллятор перейдет из основного состояния $|0\rangle$ в стационарные состояния с квантовыми числами, близкими к

$$\tilde{n} \approx \frac{f^2}{2(1-\omega)^2} \gg 1 \tag{14}$$

за время порядка $T \approx \pi |1 - \omega|^{-1} \gg 1$.

☆ Задача. Гармонический осциллятор находится в основном состоянии. Насколько близко к первому возбужденному состоянию его можно подвести однородным внешним полем, произвольно зависящим от времени?

§13.3 Гармонический осциллятор в резонансном поле

• Из приведенных выше примеров видно, что в задаче о воздействии гармонического внешнего поля на гармонический осциллятор случай точного резонанса ($\omega = \omega_0$ или $\omega = 1$) представляется совершенно особым и заслуживает отдельного рассмотрения.

Будем исходить из стандартной системы уравнений для медленных амплитуд (2.22) (базисные функции включают экспоненциальный фактор, определяющий зависимость от времени для стационарных состояний)

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m a_m V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}.$$
 (15)=(2.22)

Для оператора возмущения, описывающего однородное поле, $\hat{V}(t) = -F \hat{x} \cos \omega t$, отличны от нуля матричные элементы переходов с

изменением номера уровня на ± 1 . Таким образом, в правых частях почти всех уравнений останется только по два слагаемых; перепишем систему в виде

$$i\frac{da_n}{dt} = \Omega_{n+}\cos\omega t \, e^{-i\omega_0 t} a_{n+1} + \Omega_{n-}\cos\omega t \, e^{+i\omega_0 t} a_{n-1}.$$
(16)

Здесь

$$\Omega_{n+} = \Omega_0 \sqrt{n+1}, \quad \Omega_{n-} = \Omega_0 \sqrt{n}, \quad \Omega_0 = \frac{F}{\sqrt{\hbar m \omega_0}}.$$
(17)

С целью решения системы (16) упростим ее. Во-первых, используем приближение вращающегося поля – сохраним в правых частях только медленно осциллирующие = постоянные члены:

$$i\frac{da_n}{dt} = \frac{\Omega_{n+}}{2}a_{n+1} + \frac{\Omega_{n-}}{2}a_{n-1}.$$
 (18)

Во-вторых, считая, что нам придется иметь дело только с состояниями с большими номерами, лежащими в небольшой окрестности некоторого уровня, $n \approx n_0 \gg 1$, можно пренебречь различием между матричными элементами переходов вверх и вниз:

$$i\frac{da_{n}}{dt} = \frac{\Omega}{2} (a_{n+1} + a_{n-1}), \qquad (19)$$

где $\Omega \approx \Omega_{n_0 \pm}$. Подстановкой в это уравнение $a_n = i^n b_n$ получаем

$$\frac{db_n}{d(-\Omega t)} = \frac{1}{2} (b_{n-1} - b_{n+1}).$$
(20)

Сравнивая это уравнение с известным рекуррентным соотношением для функций Бесселя (см. [<u>ГР</u>63], формула 8.471.2)

$$\frac{dZ_{\nu}}{dz} = \frac{1}{2} \left(Z_{\nu-1} - Z_{\nu+1} \right)$$
(21)

[<u>ГР</u>63] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: - Физматгиз, 1963.

мы можем сразу же записать решение, соответствующее начальным условиям, при которых при t = 0 заселен только один уровень $|n\rangle$:

$$a_k(t) = i^k J_{n-k}(-\Omega t), \qquad (22)$$

где *n* - индекс начального состояния.

• Хотя картина поведения населенностей уровней, соседних с начально заселенным, в деталях весьма сложна (см. рисунок),



Распределение населенностей по уровням гармонического осциллятора при $\Omega t = 12$. По оси абсцисс – отклонение номера состояния от начально заселенного.

в общих чертах она вполне понятна. Обратимся к свойствам бесселевых функций, разобранным в §11.2. Уровень *k* остается практически незаселенным, пока аргумент функции Бесселя $J_{n-k}(\Omega t)$ не достигнет ее индекса |k-n|. Тогда его населенность быстро достигнет максимума max $w_k \approx 0.456 |k-n|^{-2/3}$, а затем будет убывать (осциллируя), в среднем по закону $w_k = |a_k|^2 \sim t^{-1}$. Энергетическая ширина области заселенных уровней будет увеличиваться со временем по закону $\Delta E \sim t$. Такое расплывание пакета по энергетической оси (оно зазывается *баллистическим*) идет быстрее, чем диффузионное ($\Delta E \propto \sqrt{t}$), возникающее при поглощении энергии внешнего гармонического поля квантовыми системами с квазинепрерывным энергетическим спектром (§7.3).

Из теории бесселевых функций известно соотношение

$$\Delta E^{2} = \sum (n-k)^{2} J_{n-k}^{2} (-\Omega t) = \frac{1}{2} \Omega^{2} t^{2}, \qquad (23)$$

которое показывает, что, несмотря на осцилляции населенностей отдельных уровней, рост дисперсии энергии системы является монотонным.

§13.4 Слабо нелинейный осциллятор

• В классической теории нелинейный осциллятор отличается от линейного двумя свойствами: неизохронностью (зависимостью частоты от энергии) и ангармонизмом (наличием в законе движения высших гармоник).

☆ Задача. Рассмотрим модели типа $\ddot{x} + U'(x) = 0$. Может ли нелинейная ($U' \neq kx$) система быть изохронной? Может ли нелинейная ($U' \neq kx$) система обладать гармоническим законом движения?

$$E_n = \hbar \omega_0 \left(n - \frac{\kappa}{2} n^2 \right), \tag{24}$$

где *n* - главное квантовое число (номер уровня), к - коэффициент нелинейности. Частоты переходов между соседними уровнями суть

$$\omega_t \approx \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dn} = \omega_0 (1 - \kappa n).$$
(25)

Величина ω_t неотрицательна: отсюда к $\approx \mathcal{N}^{-1}$, где \mathcal{N} - число состояний дискретного спектра. Для квазиклассических систем число связанных состояний пропорционально корню из борновского параметра $B = 2mU_0a^2\hbar^{-2}$: $\mathcal{N} \sim \sqrt{B}$. Для двухатомных молекул $B \approx 10^4$ и к $\approx 10^{-2}$.

• Если частота внешнего гармонического поля ω находится в точном резонансе с переходом $n \rightarrow n+1$, $\omega = \omega_0(1 - \kappa n)$, то расстройка частоты поля от резонанса с переходом $n \rightarrow n-1$ есть $\Delta = \omega_0 \kappa$. При выполнении условия

$$\beta_d = \frac{\Omega}{\omega_0 \kappa} \ge 1 \tag{26}$$

нельзя пренебречь переходами в состояние $|n-1\rangle$: модель двухуровневой системы теряет применимость.

§13.4 Классический нелинейный осциллятор в гармоническом поле: нелинейный резонанс и бистабильность

• Рассмотрим классическую модель нелинейного *осциллятора Дуффинга* во внешнем гармоническом поле, заданную уравнением движения [ЛЛІ, §28]

$$m\ddot{x} + m\omega_0^2 \left(x + \lambda x^3 \right) = m\lambda^{-1/2}\omega_0^2 F \cos\omega t \,. \tag{27}$$

Принимая $m, \omega_0, \lambda \equiv 1$, уравнение (27) можно переписать в приведенной форме

$$\ddot{x} + x + x^3 = F\cos\omega t. \tag{28}$$

Такая модель определяется двумя безразмерными параметрами *F* и ω. Введем эффективную расстройку

$$\Delta = \frac{\omega^2 - 1}{2}.$$
 (29)

При $\omega \approx 1 \Delta \approx \omega - 1$.

• Если действующая на систему сила мала, $F \ll 1$, то периодическое с периодом внешнего поля движение системы может описываться гармоническими колебаниями, $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$. Амплитуда этих колебаний A удовлетворяет уравнению [ЛЛІ, §29]

'10

$$A^{2} \left(\Delta - \frac{3}{8} A^{2} \right)^{2} = \frac{F^{2}}{4}.$$
 (30)

При фиксированной расстройке Δ и достаточно малых *F* уравнение (30) имеет три положительных корня, $A_d < A_s < A_u$:

$$A_d \approx \frac{F}{2\Delta} \ll \Delta \ll 1 \tag{31}$$

$$A_{u,s} \approx \sqrt{\frac{8}{3}\Delta} \pm \frac{F}{2\Delta}$$
 (32)

Как будет показано ниже, решения u и d устойчивы, а решение s неустойчиво.



• Выше описан случай точного резонанса. Исследуем движение системы вблизи резонанса методом медленно меняющихся амплитуд (ММА), положив

$$x(t) = q(t)\cos\omega t + p(t)\sin\omega t.$$
(33)

При дополнительных предположениях $\Delta \ll 1$, $F \ll 1$ получаем уравнения движения для медленных амплитуд

$$\dot{q} = -\frac{2\Delta}{\omega}p + \frac{3}{4\omega}(q^2 + p^2)p, \qquad (34)$$

$$\dot{p} = \frac{F}{\omega} + \frac{2\Delta}{\omega}q - \frac{3}{4\omega}(q^2 + p^2)q$$
(35)

Это - система канонических уравнений для гамильтониана

$$\Lambda(p,q) = T(p,q) + V(q), \qquad (36)$$

$$T(p,q) = -\frac{\Delta}{\omega} p^2 \left[1 - \frac{3}{16\Delta} \left(2q^2 + p^2 \right) \right],$$
 (37)

$$V(q) = -\frac{F}{\omega}q - \frac{\Delta}{\omega}q^2 + \frac{3}{16\omega}q^4.$$
 (38)

Система (34,35) может интерпретироваться как автономная модель, описывающая движение частицы переменной (и даже знакопеременной!) массы в потенциальном поле V(q). Потенциал V(q) имеет три точки экстремума, соответствующие (в порядке возрастания q) решениям s,d и uсоответственно.



В областях положительной массы минимумы потенциала соответствуют устойчивым точкам (u), а в областях отрицательной массы - неустойчивым (s); устойчивы максимумы потенциала (d)

 \Rightarrow Задача. Линеаризовав систему (34,35) вблизи точек d и u, найти частоты малых колебаний системы вблизи этих положений равновесия.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #14 СЛАБО НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР - 2

§14.1 Квантовый нелинейный осциллятор в гармоническом поле: динамическое туннелирование

• Автономной гамильтоновой системе, введенной в §13.4 для описания движения вблизи нелинейного резонанса, может быть сопоставлена квантовая модель - заменой q и p на канонические операторы,

$$\left[\hat{q},\hat{p}\right] = i\hbar. \tag{1}$$

★ Такая замена приближенна: из исходных динамических уравнений следует, что $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar + \hbar O(\Delta, q^2, p^2)$. В области применимости уравнений, полученных методом ММА, поправки малы.

Бистабильность системы (13.34,35) - наличие двух фазовых траекторий с одной энергией при $V(s) \le \Lambda \le V(d)$ - в квантовом случае исчезает ввиду возможности *динамического туннелирования* системы из одной области в другую. В квантовом случае состояние, локализованное вблизи "*u*", устойчиво, а состояние, локализованное вблизи "*d*", неустойчиво.

★ Концепция динамического туннелирования введена в работе Хеллера и Дэвиса [HD81]. Их определение таково:

kind" of tunneling, namely, dynamical tunneling. Dynamical tunneling is simply a classically forbidden process which does not happen to involve an energetically insurmountable potential barrier. Many examples are known

[HD81] E.C. Heller and M.J. Davis

Quantum Dynamical Tunneling in Large Molecules. A Plausible Conjecture J. Phys. Chem., 1981, v. 85, no. 4, pp. 307 – 309.

• Оценим матричный элемент перехода из состояния *d* в окрестность состояния *u* методом ВКБ (ср. [ЛЛIII, §50, задача 3]). Положим

$$\psi(q) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int pdq\right). \tag{2}$$

В отличие от обычного УШ, из-за наличия в гамильтониане Λ (13.36) членов четвертого порядка по *p* в задаче присутствуют две ветви квадрата импульса:

$$p_{\pm}^{2} = \frac{8\Delta}{3} - q^{2} \pm \frac{4}{3}\sqrt{4\Delta^{2} + 3Fq + 3\omega\Lambda} .$$
 (3)

Точки поворота определяются соотношением $p^2(q) = 0$ и лежат на кривой $\Lambda = V(q)$, Обе ветви квадрата импульса совпадают на прямой, заданной уравнением $\Lambda = -\frac{4\Delta^2}{3\omega} - \frac{Fq}{\omega}.$

$$V(x_n)$$

 $V(x_n)$
 $V(t_m)$
 $V(t$

Эта прямая касается кривой V(q) в точках с абсциссами q_{-} и q_{+} . Внутри интервала (q_{-},q_{+}) лежат точки поворота ветви p_{-} , а вне него - ветви p_{+} .

Скорость перехода между состояниями d и u определяется, в основном, квазиклассическим выражением для подбарьерного движения:

$$M \sim \exp(-S/\hbar),\tag{5}$$

где "подбарьерное действие" *S* определяется выражением

$$S = \int_{c}^{a} |p_{-}(q)| dq - \int_{c}^{b} |p_{+}(q)| dq.$$
 (6)

Здесь a есть координата состояния d (двойная точка поворота ветви p_{-}), b - точка поворота ветви p_+ при энергии $\Lambda = \Lambda(d), c$ - координата точки равенства импульсов на двух ветвях p_+ при энергии $\Lambda = \Lambda(d)$. Асимптотика S при $F \rightarrow 0$ имеет вид

$$S \approx \frac{8\Delta}{3} \ln \left(\frac{4\Delta^2}{3F} \right). \tag{7}$$

Экспонента приобретает вид

(4)

$$e^{-S/\hbar} \approx \left(\frac{3F}{4\Delta^2}\right)^{2\frac{4\Delta}{3\hbar}}.$$
 (8)

Она зависит от силы F, пропорциональной напряженности поля \mathscr{E} , степенным образом: $W \sim F^{2N}$, где величина

$$N = \frac{4\Delta}{3\hbar}.$$
 (9)

в квазиклассическом случае велика. Учитывая, что энергия состояния u, в котором частота перехода между соседними уровнями близка к частоте поля, есть $E_u \approx 4\Delta/3$, видим, что N есть число квантов, необходимых для перехода в состояние u. Квазиклассический расчет приводит к выводу о пропорциональности скорости динамического туннелирования между состоянием с малой амплитудой d и состоянием с большой амплитудой u интенсивности поля в степени, равной числу поглощаемых при переходе квантов. К такому же результату приведет и расчет по теории возмущений: скорость N-фотонного перехода пропорциональна F^{2N} (см. §9.1).

★ Пример. Возьмем типичные для моделей молекулярных колебаний значения $m = 10^{-22} c$, $\omega_0 = 6.3 \cdot 10^{13} c^{-1}$ и $\lambda^{-1/2} = 2.0 \cdot 10^{-8} cm$. В этих единицах постоянная Планка $\hbar = 4.18 \cdot 10^{-4}$. При расстройке $\Delta = 0.2 \ll 1$ состоянию *u* будет соответствовать уровень с номером $N = 636 \gg 1$. При малой возмущающей силе $F = 0.04 \ll \Delta$ численный расчет интеграла дает для величины S/\hbar значение $1165 \gg 1$. Какую характерную частоту ставить при экспоненте $\exp(-S/\hbar)$, уже неважно – практически величина скорости перехода есть ноль. Выбранное значение силы соответствует напряженности поля излучения $\mathcal{E} \approx 6.6 \cdot 10^5 \Gamma c$ и его интенсивности $I \approx 5.2 \cdot 10^{13} Bm cm^{-2}$.

Хотя в строгом смысле состояние нелинейного осциллятора d с малой амплитудой вынужденных колебаний в квантовом случае неустойчиво, но его время жизни даже в очень сильных полях на много порядков больше типичной длительности лазерного импульса.

§14.2 Квантовый нелинейный осциллятор в гармоническом поле: квазиэнергетические состояния и квантовый нелинейный резонанс

• *Квантовым нелинейным резонансом* (КНР) называется явление, возникающее в слабо нелинейных системах под действием внешнего поля, гармонически зависящего от времени. Оно состоит в возникновении

квазиэнергетических состояний, составленных из многих стационарных состояний системы из области спектра, в которой частоты переходов между соседними состояниями (или, что то же самое, частоты классического движения) близки к частоте внешнего поля. Такое явление было впервые рассмотрено Берманом и Заславским [ВZ77]

 [BZ77] Berman G.P., Zaslavsky G.M. Theory of quantum nonlinear resonance Phys. Lett. A, 1977, vol. 61, no. 5, pp. 295 – 296.

с помощью модели с гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\hat{p}, \hat{x}) - F\hat{x}\cos\omega t, \qquad (10)$$

описывающим воздействие гармонического поля на автономную систему с одной степенью свободы. В дальнейшем амплитуду силы *F* будем называть полем.

• В стандартной модели для описания КНР приняты три упрощающих предположения.

• Во-первых, энергетический спектр невозмущенной системы описывается квадратичным выражением

$$E_n = \hbar \varepsilon_n = \hbar \omega_0 \left(n - \frac{\kappa}{2} n^2 \right), \qquad (11) \equiv (13.24)$$

где к≪1 - безразмерный коэффициент нелинейности.

² Во-вторых, матричные элементы оператора координаты \hat{x} считаются отличными от нуля только для переходов между соседними уровнями:

$$x_{n,k} \propto \delta(k, n+1) + \delta(k, n-1) \tag{12}$$

Тем самым устраняются матричные элементы, ответственные за генерацию высших гармоник.

Э В-третьих, матричные элементы считаются постоянными

$$x_{n,k} = X \Big[\delta(k, n+1) + \delta(k, n-1) \Big]$$
(13)

(так же, как предполагалось в § 13.3 при рассмотрении задачи о гармоническом осцилляторе во внешнем резонансном поле).

Основные параметры модели удобно привести к форме частот. Первым является «первая расстройка» $\Delta = \kappa \omega_0$, представляющая собой разность частот двух соседних переходов, вторым является частота Раби $\Omega = FX/\hbar$, а третьим – частота поля ω . Считая невозмущенную систему квазиклассической, мы будем всегда полагать $\Delta \ll \omega$. Частота Раби Ω может принимать произвольные значения.

Нестационарное УШ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 - F\hat{x}\cos\omega t\right)\Psi \tag{14}$$

подстановкой разложения Ψ по базису стационарных состояний

$$\Psi = \sum c_n(t)\varphi_n(x)\exp(-i\varepsilon_n t)$$
(15)

сводится к системе уравнений для амплитуд $c_n(t)$

$$i\dot{c}_{n} = -\frac{\Omega}{2} \bigg[e^{i(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n} - \omega)t} + e^{i(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n} + \omega)t} \bigg] c_{n+1} - \frac{\Omega}{2} \bigg[e^{i(\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_{n} - \omega)t} + e^{i(\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_{n} + \omega)t} \bigg] c_{n-1}$$
(16)

Определим резонансный уровень *r* (номер которого не обязательно целый!) как такой, для которого формальная частота перехода

$$\omega_t(n) = \hbar^{-1} \frac{dE_n}{dn} = \omega_0 (1 - \kappa n)$$
(17)

равна частоте внешнего поля:

$$\omega_0(1 - \kappa r) = \omega. \tag{18}$$

Положим теперь n = r + q: переменная q указывает номер уровня, отсчитанный от резонансного. Для величин, входящих в показатели экспонент, получаем

$$\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \omega - \Delta q - \frac{\Delta}{2}, \qquad (19)$$

$$\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n = -\omega + \Delta q - \frac{\Delta}{2}.$$
 (20)

Подстановкой

$$c_q = a_q \exp\left(i\Delta\frac{q^2}{2}t\right) \tag{21}$$

система уравнений для амплитуд сводится к виду

$$i\frac{da_{q}}{dt} = \Delta \frac{q^{2}}{2}a_{q} - \frac{\Omega}{2}\left(1 + e^{-2i\omega t}\right)a_{q+1} - \frac{\Omega}{2}\left(1 + e^{2i\omega t}\right)a_{q-1}$$
(22)

Если $\Omega \ll \Delta$, то в резонансе может находиться только один переход, и модель эквивалентна двухуровневой системе (§ 10.1). Если $\Delta \ll \Omega \ll \omega$, то оправдано приближение вращающегося поля, и экспонентами с час-

тотой поля в (22) можно пренебречь. Система уравнений приобретает вид

$$i\frac{da_{q}}{dt} = \Delta \frac{q^{2}}{2}a_{q} - \frac{\Omega}{2}a_{q+1} - \frac{\Omega}{2}a_{q-1}.$$
 (23)

Ее можно интерпретировать как систему уравнений для амплитуд в одномерной цепочке со взаимодействием ближайших соседей и энергией, квадратично зависящей от номера узла.

• Считая зависимость a(q) плавной, можно континуализовать уравнения (23) (ср. § 7.3), считая q непрерывной переменной, разложив $a(q \pm 1)$ в ряд Тейлора и ограничившись первыми тремя членами:

$$a(q \pm 1) \approx a(q) \pm \frac{\partial a(q)}{\partial q} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 a(q)}{\partial q^2}.$$
 (24)

В результате приходим к уравнению для функции a(q,t):

$$i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\hbar\Omega}{2}\frac{\partial^2 a}{\partial q^2} + \hbar\Delta\frac{q^2}{2}a - \hbar\Omega a\,. \tag{25}$$

Его можно интерпретировать как нестационарное УШ для гармонического осциллятора. Роль независимой переменной теперь играет отклонение q по номеру уровня стационарного состояния от резонансного; мы будем называть модель (25) энергетическим осциллятором. Параметры этой модели можно интерпретировать в терминах обычного гармонического осциллятора с массой \tilde{m} и собственной частотой $\tilde{\omega}$. Тогда

$$\frac{\hbar^2}{\tilde{m}} = \hbar\Omega, \quad \tilde{m}\tilde{\omega}^2 = \hbar\Delta.$$
(26)

Собственная частота колебаний энергетического осциллятора равна

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\Omega \Delta} . \tag{27}$$

Последний член в правой части (25) соответствует сдвигу начала отсчета энергии и не имеет значения.

• Стационарные состояния энергетического осциллятора (25) описывают квазиэнергетические состояния, образованные суперпозициями стационарных состояний $\phi_n(x)$ исходного нелинейного осциллятора с номерами $n \approx r$, лежащими вблизи резонансного значения. Эти состояния называются захваченными в квантовый нелинейный резонанс. Они описываются функциями вида

$$a_m(q,t) = H_m(q)e^{-i\tilde{\omega}\left(m+\frac{1}{2}\right)t},$$
(28)

$$\Phi_0(q) = \pi^{-1/4} \beta^{-1/8} \exp\left(-\frac{q^2}{2\sqrt{\beta}}\right)$$
(29)

где $\beta = \Omega/\Delta \gg 1$. Величина β есть параметр нестационарной теории возмущений для перехода, соседнего с резонансным (см. (2.37)).

• Из (29) следует, что минимальное число состояний, захваченных в нелинейный резонанс, есть

$$\delta n_{-} \approx \beta^{1/4}. \tag{30}$$

Следует отметить, что решение (29) хорошо согласуется с численными расчетами даже при значениях β порядка всего лишь нескольких единиц.



Оценим максимальное число состояний, которые могут быть захвачены в нелинейный резонанс. Из уравнения (23) можно оценить max q как значение, при котором величина потенциальной энергии сравняется с матричным элементом перехода, откуда максимальное число захваченных в резонанс состояний

$$\delta n_+ \approx \beta^{1/2} \tag{31}$$

Полное число КЭС, захваченных в нелинейный резонанс, можно оценить как отношение ширины зоны в цепочке (23) к энергии кванта эффективного осциллятора:

$$\mathscr{N} \approx \frac{2\Omega}{\tilde{\omega}} \approx 2\beta^{1/2}$$
 (32)

☆ Задача. Оценить среднее расстояние между нулями ВФ самого широкого из захваченных в КНР квазиэнергетических состояний.



Профили плотности вероятности квазиэнергетических состояний при $\beta = 60$. (резонансный уровень r = 40). Максимальная полуширина захваченного в КНР КЭС $\delta n_+ \approx 18$.

★ Пример. Для молекулярного осциллятора с $\omega_0 = 6.3 \cdot 10^{13} \ c^{-1}$ и к = 5 · 10⁻³ величина «первой расстройки» $\Delta = \kappa \omega_0 = 3.15 \cdot 10^{11} \ c^{-1}$. При частоте внешнего поля $\omega = 0.9\omega_0$ резонансный уровень имеет номер r = 20. Матричный элемент перехода между соседними уровнями может быть взят из модели гармонического осциллятора: $X \approx \sqrt{\hbar/M\omega_0} \sqrt{r}$. При $M = 20m_p$ получаем $X = 3.17 \cdot 10^{-9} \ cm$. В поле стандартной напряженности $\mathcal{E}_s = 915 \ \Gamma c$ частота Раби $\Omega = 1.32 \cdot 10^{12} \ c^{-1}$, и параметр теории возмущений $\beta = \Omega/\Delta = 4.18$. Частота колебаний в нелинейном резонансе (частота перехода между соседними квазиэнергетическими состояниями) при этих условиях $\tilde{\omega} = 6.48 \cdot 10^{11} \ c^{-1} = 0.01\omega_0$.

В квантовом нелинейном резонансе нелинейный осциллятор обладает $\mathscr{N} \approx 2\beta^{1/2}$ квазиэнергетическими состояниями, локализованными в окрестности резонанса и заключающими в себе от $\delta n_{-} \approx \beta^{1/4}$ до $\delta n_{+} \approx \beta^{1/2}$ состояний базиса. Разность (соседней пары) квазиэнергий таких состояний, $\hbar \tilde{\omega} = \hbar \sqrt{\Omega \Delta}$, пропорциональна корню из амплитуды внешнего поля.

§14.3 Квантовый нелинейный осциллятор в гармоническом поле: сильное поле

• Выше мы ограничились случаем умеренно сильного поля, когда частота Раби была связана неравенствами $\Delta \ll \Omega \ll \omega$. В случае сильного поля, при $\Omega \gg \omega$, нельзя пренебрегать быстро вращающимися членами в уравнении (22). Проводя континуализацию этого уравнения, для сильного поля получаем уравнение (33) \Downarrow

$$i\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\Omega}{2}\frac{\partial^2 a}{\partial q^2} (1 + \cos 2\omega t) - \Omega a (1 + \cos 2\omega t) + i\Omega \frac{\partial a}{\partial q} \sin 2\omega t + \Delta \frac{q^2}{2}a.$$

По сравнению с (25) в этом уравнении добавились три высокочастотных члена. Первый описывает модуляцию эффективной массы: дважды за период поля она проходит значения от $\tilde{m}/2$ до ∞ . Второй описывает модуляцию дна потенциальной ямы: он физически неважен и может быть включен в общую фазу волновой функции. Наконец, третий описывает действующую на осциллятор гармоническую силу, пропорциональную импульсу. Перед нами задача о движении квантового параметрически модулированного гармонического осциллятора под действием переменной внешней силы.

Для дальнейших расчетов технически удобно сделать замену $t \to -t, q \to -q$. Уравнение примет вид (34) \Downarrow

$$i\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\Omega}{2}\frac{\partial^2 a}{\partial q^2} \left(1 + \cos 2\omega t\right) + \Omega a \left(1 + \cos 2\omega t\right) - i\Omega \frac{\partial a}{\partial q}\sin 2\omega t - \Delta \frac{q^2}{2}a$$

Мы будем рассматривать эволюцию самого компактного КЭС, которое в умеренном поле описывается ВФ (29). Действуя по аналогии с решением Хусими (§ 12.5), будем искать решение уравнения (34) в виде гауссова пакета с переменными параметрами

$$a(q) = \exp\left(-fq^2 - gq - h\right). \tag{35}$$

Параметр f контролирует ширину пакета, g - положение его центра, а h обеспечивает сохранение нормировки пакета. Подставляя (35) в (34) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях q, получаем систему уравнений

$$-i\dot{f} = -\frac{\Delta}{2} + 2\Omega f^2 \left(1 + \cos 2\omega t\right), \qquad (36)$$

$$-i\dot{g} = 2\Omega fg(1 + \cos 2\omega t) + 2if\Omega \sin 2\omega t, \qquad (37)$$

$$-i\dot{h} = \Omega \left(1 - f + \frac{g^2}{2}\right) (1 + \cos 2\omega t).$$
 (38)

Нас интересуют периодические решения этой системы.

• Свойства системы (36-38) существенно зависят от величины безразмерного параметра $\varepsilon = \Omega \Delta / \omega^2$, который в области сильного поля может быть как мал, так и велик. Начнем со случая $\varepsilon \ll 1$, в котором можно найти приближенные решения уравнений (36) и (37) в форме быстро сходящихся рядов Фурье. Ограничиваясь гармоникой частоты 2 ω , получаем

$$f = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\Delta}{\Omega}} + \frac{1}{4}\frac{\sqrt{\Omega\Delta^3}}{\omega^2 - \Omega\Delta}\cos 2\omega t + \frac{i}{4}\frac{\omega\Delta}{\omega^2 - \Omega\Delta}\sin 2\omega t, \quad (39)$$

$$g = \frac{2\omega\sqrt{\Omega\Delta}}{4\omega^2 - \Omega\Delta}\cos 2\omega t + i\frac{\Omega\Delta}{4\omega^2 - \Omega\Delta}\sin 2\omega t.$$
 (40)

Постоянный член в (39) описывает уже известное нам значение нулевого приближения $f_0 = 1/2\sqrt{\beta}$ (см. (29)). Решения (39, 40) показывают, что центр гауссова пакета осциллирует по гармоническому закону с частотой 2 ω и амплитудой

$$Q = \frac{2\omega\Omega}{4\omega^2 - \Omega\Delta}.$$
 (41)

Заметим, что при

$$\Omega > 2^{2/3} \omega^{4/3} \Delta^{-1/3} \tag{42}$$

амплитуда осцилляций превосходит ширину пакета: состав заселенных состояний, образующих компактное КЭС, почти полностью обновляется на протяжении периода поля.

☆ Задача. При каком условии режим (42) будет достижим в области ε ≪1?

Далее, ширина гауссова пакета меняется по гармоническому закону с частотой 2ω , причем относительная амплитуда осцилляций ширины мала вместе с ε :

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta^{1/4} \left[1 + \frac{\Delta \Omega}{2(\omega^2 - \Delta \Omega)} \cos 2\omega t \right].$$
(43)

• Среднее значение координаты исходного осциллятора дается выражением

$$x(t) = X \sum_{q} \left[a_{q}^{*}(t) a_{q-1}(t) e^{i\omega t} + a_{q}^{*}(t) a_{q+1}(t) e^{-i\omega t} \right].$$
(44)

Используя выражения (35), (39) и (40) и заменяя суммирование в (44) интегрированием, получаем для закона движения в двухмодовом приближении выражение

$$x(t) = B_1 \cos \omega t + B_3 \cos 3\omega t, \qquad (45)$$

где

$$B_1 = 2X \left(1 - \frac{\Omega \Delta}{8\omega^2} \right) \exp\left(-\sqrt{\frac{\Delta}{16\Omega}} \right)$$
(46)

$$B_3 = X \frac{\Omega \Delta}{4\omega^2} \exp\left(-\sqrt{\frac{\Delta}{16\Omega}}\right)$$
(47)

Выражение для амплитуды первой гармоники в пределе $\hbar \to 0$ дает $B_1 \approx 2X$, что совпадает с классическим выражением. Второй член в (45) показывает, что в системе, где в спектре невозмущенного движения высшие гармоники по построению модели отсутствуют (отличны от нуля только матричные элементы перехода между соседними состояниями), возмущенное гармоническим полем движение обладает слабой компонентой на третьей гармонике, пропорциональной амплитуде поля, квадрату амплитуды первой гармоники и сохраняющейся в классическом пределе.

★ Подчеркнем, что эта компонента принципиально отличается от обычного в теории нелинейных колебаний вклада на третьей гармонике, пропорционального кубу амплитуды поля. С другой стороны, отметим аналогию с задачей о резонансной кубичной поляризуемости двухуровневой системы (§11.1), где две амплитуды компонент излучения вблизи третьей гармоники пропорциональны квадрату амплитуды поля.

• Вывод о наличии компоненты на третьей гармонике не является артефактом приближений, сделанных в квантовой задаче, и может быть получен классически. Пусть, например, гамильтониан \hat{H}_0 описывает частицу, движущуюся в потенциале U(x). Выберем начальные условия так, чтобы движение невозмущенной системы в соответствии с уравнением

$$m\ddot{x} + U_x = 0 \tag{48}$$

при энергии E было периодическим с частотой ω , $x_0(t) = \sum_k A_k \cos k\omega t$.

Пусть также и движение возмущенной системы (с уравнением движения $m\ddot{x} + U_x = F\cos\omega t$) происходит с частотой ω , в резонансе со внешним полем: $x_1(t) = \sum_k B_k \cos k\omega t$. Разность между этими двумя законами движения, $\xi(t) = x_1(t) - x_0(t)$, назовем *резонансным откликом* системы. По определению резонансный отклик является периодической функцией, представимой рядом Фурье. Если внешнее поле мало, $F \to 0$, то в низшем порядке резонансный отклик может быть найден как пропорциональное F периодическое решение уравнения

$$m\ddot{\xi} + U_{xx}\xi = F\cos\omega t \,. \tag{49}$$

Фундаментальными решениями соответствующего однородного уравнения являются функции $\phi_1 = \dot{x}_0$ и $\phi_2 = x'_0$ (здесь и далее штрих означает дифференцирование по энергии *E*, соответствующей невозмущенному движению). Они позволяют выразить фурье-амплитуды резонансного отклика через фурье-амплитуды невозмущенного движения, их производные по энергии и производную от частоты по энергии, $\xi(A_k, A'_k, \omega, \omega')$. Общие формулы громоздки, но в интересующем нас случае, дающем аналог описанной в § 14.2 квантовой модели, при $A_k \equiv 0$ для всех $k \ge 2$ (эквивалент условия сильного отбора (12)) и $A'_k \equiv 0$ для всех k (эквивалент условия постоянства матричных элементов (13)), они упрощаются и дают

'10

$$\xi_1 = -\frac{1}{16} F A_1^2 \frac{\omega'}{\omega} = -\xi_3 \tag{50}$$

в полном соответствии с квантовыми формулами (46, 47).

Подведем итог. При воздействии на слабо нелинейную квантовую систему с одной степенью свободы сильного гармонического поля, для которого выполняются условия $\omega \ll \Omega \ll \omega^2 \Delta^{-1}$, захваченные в квантовый нелинейный резонанс пакеты КЭС периодически изменяют свой состав. При $\Omega \ge \omega^{4/3} \Delta^{-1/3}$ это изменение велико в том смысле, что величина $|\langle \Psi(t_1) | \Psi(t_2) \rangle|$ может стать сколь угодно малой. Энергетическая ширина пакетов КЭС тоже периодически меняется, но это изменение является относительно слабым. Фазы (а при $\Omega \ge \omega^{4/3} \Delta^{-1/3}$ также и модули) амплитуд образующих КЭС стационарных состояний изменяются быстро (характерные скорости изменения порядка $\Omega \gg \omega$), но компенсация вкладов соседних состояний оставляет в законе движения координаты $\langle x(t) \rangle$ только слабый ангармонический вклад – в соответствии с классической теорией резонансного отклика.

★ Выше мы ограничивались случаем $\varepsilon = \Omega \Delta \omega^{-2} \ll 1$. Противоположный случай, $\varepsilon \ge 1$, который можно назвать случаем гигантского поля, не требует специального рассмотрения. Дело в том, что параметр $\varepsilon = FX\omega'\omega^{-1}$ не содержит \hbar и потому не затрагивается квазиклассическим предельным переходом. Величина ε определяет тип классического движения системы. Неравенство $\varepsilon \ge 1$ можно переписать в виде $\Delta \omega = \sqrt{FX\omega\omega'} \ge \omega$. Левая часть неравенства представляет собой характерную ширину нелинейного резонанса по частоте. Если эта величина превосходит частоту внешнего поля, то в соответствии с известным критерием перекрытия резонансов Чирикова, движение является сильно хаотическим, а резонансное решение (периодическое с частотой внешнего поля), которое мы рассматривали, теряет устойчивость. В этом случае конструктивное аналитическое описание системы невозможно.

EOL 💽

КОНЕЦ ЛЕКЦИЙ ВЕСЕННЕГО СЕМЕСТРА

ЛЕКЦИЯ #15 ИТОГИ СЛАБО НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ШИРОКОПОЛОСНОМ ПОЛЕ

§15.1 Итоги

• Подведем итоги сделанному ранее. Практически во всех задачах эволюция атомной системы S, взаимодействующей со внешним полем, описывалась нестационарным уравнением Шредингера (УШ)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right] \Psi.$$
(2.20)

Наиболее часто рассматривался случай, в котором оператор $\hat{V}(t)$ зависел от времени по гармоническому закону – например, $\hat{V}_0 \cos \omega t$ – что давало первое приближение к описанию эволюции в поле монохроматической электромагнитной волны (см. § 2.2).

Разложение ВФ системы $\Psi(\vec{r},t)$ по модам - по базису стационарных состояний невозмущенной системы,

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{m} a_m(t) \varphi_m(\vec{r}) e^{-i\omega_m t}, \qquad (2.21)$$

позволяет превратить уравнение (2.20) в систему уравнений для амплитуд

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_m a_m V_{km}(t) e^{i\omega_{km}t}.$$
 (2.22)

Для гармонического возмущения классификация типов задач и методов их решения привязана к параметрам

$$\beta_{nk} = \frac{\Omega_{nk}}{\Delta_{nk}}$$

где $\Omega_{kn} = V_{kn}/\hbar$ - частота Раби для данного перехода, а $\Delta = \omega_{kn} - \omega$ - расстройка частот перехода и поля (подразумевается $\omega_{kn} > 0$).

• Система (2.22) может решаться методом итераций: на первом этапе в правую часть подставляются начальные значения амплитуд, а затем они заменяются выражениями, найденными в предыдущем приближении. Такой подход называется *нестационарной теорией возмущений*. Если неравенства $\beta_{nk} \ll 1$ выполняются для всех переходов (нет резонансных переходов), то такое решение с хорошей точностью применимо при всех временах. Если для некоторых состояний $\beta_{nk} \gg 1$, то итерационное решение эффективно только на начальной стадии процесса. Эту
'10

$$W_{\Sigma} = \sum_{k} \frac{\left| V_{kn} \right|^{2}}{4\hbar^{2}} t^{2} = \frac{\left| V_{nn}^{2} \right|}{4\hbar^{2}} t^{2}$$
(3.2)

а на втором – по линейному,

$$W_{\Sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\left|V_{kn}\right|^2}{4} \rho(E_k) t \,. \tag{3.7}$$

Традиционно принято выбирать возмущение со временной зависимостью $\hat{V}e^{-i\omega t}$, что увеличивает матричный элемент в два раза по сравнению с нашим случаем, и оформлять (3.7) как утверждение о постоянстве суммарной скорости переходов:

$$\dot{W}_{\Sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{kn} \right|^2 \rho(E_k).$$
(3.8)

Формула (3.8) называется золотым правилом Ферми.

Так же называется выражение для скорости переходов между двумя уровнями под воздействием возмущения, представляющего стационарный случайный процесс: $\hat{V}(t) = \hat{V}\xi(t)$, где безразмерная случайная функция $\xi(t)$ нормирована условием $\langle \xi^2(t) \rangle = 1$; предположим также, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$. Тогда (на временах, превосходящих время корреляции случайного процесса)

$$\left\langle \dot{W}_{k}\right\rangle =\frac{2\pi}{\hbar^{2}}\left|V_{nk}\right|^{2}S\left(-\omega_{kn}\right)$$
(4.24)

где $S(\omega)$ есть спектральная плотность шума.

В нерезонансном случае решение системы (2.22) позволяет построить функцию отклика – *тензор линейной поляризуемости* системы *S*

$$\chi_{\alpha\beta}'(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{k} \frac{2\omega_{kn} (r_{\alpha})_{nk} (r_{\beta})_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}$$
(5.5)

Эта формула описывает вещественную часть поляризуемости. Мнимая часть $\chi''(\omega)$ описывает процессы, при которых система *S* поглощает энергию с постоянной скоростью $\dot{E} = Q$:

$$Q = \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) \mathcal{E}^2 \tag{6.20}$$

Такие процессы могут происходить при тех же условиях, которые определяют применимость золотого правила Ферми.

Даже если скорости переходов вверх и вниз по спектру равны, энергия системы не остается неизменной: распределение по энергии со временем уширяется. Для простейшей модели с $\dot{W}_{+} = \dot{W}_{-} = \Gamma$ при точно определенном начальном значении энергии ее дисперсия $\Delta E = \overline{E^2} - \overline{E}^2$ меняется на малых временах по закону

$$\Delta E \approx 2\hbar^2 \omega^2 \Gamma t \,. \tag{7.27}$$

Это уширение распределения системы по энергии называется энергетической диффузией.

• Методы, альтернативные теории возмущений, классифицируются по числу резонансных переходов, для которых

$$\beta_{nk} = \frac{\Omega_{nk}}{\Delta_{nk}} \gg 1$$

Во всех этих случаях удобно и важно ставить задачу отыскания квазиэнергетических состояний (§ 12.1).

• Если $\beta_{nk} \gg 1$ только для одного состояния $|k\rangle$, то имеется случай изолированного резонанса. Он возможен в любой системе с неэквидистантным спектром при сколь угодно малом возмущении. Если при этом для всех остальных состояний $|m\rangle \neq |n\rangle, |k\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_m(t)| \ll 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле вводится модель **двухуровневой системы**, учитывающая амплитуды только двух состояний системы \hat{H}_0 , связанных резонансным переходом.

Укороченная до двух уравнений система (2.21) для гармонического поля допускает точное решение в *приближении вращающегося поля* (§ 10.1), применимого при условии малости параметра

$$\beta_{+} = \frac{\Omega_{21}}{\omega_{21}}.$$
 (10.3)

Уточнение этого решения с помощью теории возмущений по параметру β_+ позволяет описать эффект сдвига резонансной частоты перехода гармоническим полем (*сдвиг Блоха – Зигерта*, § 10.3) и резонансную кубичную поляризацию двухуровневой системы (§ 11.1). • Особый случай представляет модель *гармонического осциллятора.* В силу эквидистантности спектра для нее резонансными становятся одновременно переходы между всеми соседними уровнями, и двухуровневое приближение неприменимо. Эта модель должна быть рассмотрена отдельно.

Благодаря простоте осциллятора, для него возможно получение точных законов движения операторов в гейзенберговской картине (§ 2.4), позволяющим найти выражение для отклика, пригодное при любой величине поля, и построение полной системы *решений Хусими* для нестационарного УШ в шредингеровской картине (§ 12.5).

При небольших упрощениях система (2.22) может быть решена и в случае точного резонанса, описывая баллистический рост ширины энергетического распределения (§13.3).

• Промежуточный случай образует модель слабо ангармонического осциллятора. Для системы со спектром вида

$$E_n = \hbar \omega_v \left(n - \frac{\kappa}{2} n^2 \right) \tag{14.10}$$

основную роль играет параметр

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\kappa \omega_v},$$

где Ω - частота Раби. При $\beta_r \ll 1$ допустимо применение модели двухуровневой системы. Если $\beta_r \ge 1$, то возмущение находится в резонансе со многими переходами, и модель ДУС теряет применимость. Такую ситуацию называют *квантовым нелинейным резонансом*.

Континуализация системы уравнений (2.22) позволяет определить вид КЭС в энергетическом состоянии: в окрестности резонансного уровня, для которого формальная частота перехода

$$\omega_t(n) = \hbar^{-1} \frac{dE_n}{dn} = \omega_0 (1 - \kappa n)$$
(14.17)

равна частоте внешнего поля: $\omega_0(1 - \kappa r) = \omega$, КЭС включают большое число уровней базиса, меняющееся от минимального $\delta n_- \approx \beta_r^{1/4}$ до максимального $\delta n_+ \approx \beta_r^{1/2}$.

§15.2 Гармонический осциллятор в широкополосном внешнем поле.

• В лекции L14 была рассмотрена динамика слабо ангармонического осциллятора в гармоническом внешнем поле. Завершим рассмотрение этой модели задачей о поведении такой системы в широкополосном внешнем поле.

◆ Начнем с анализа предельно упрощенной модели, в которой пренебрежем как ангармонизмом системы, так и зависимостью матричных элементов от номера уровня (ср. §13.3, переход от (18) к (19)). Переходы между соседними уровнями происходят с постоянной скоростью

$$\left\langle \dot{W}_{k}\right\rangle = \frac{2\pi}{\hbar^{2}} \left| V_{nk} \right|^{2} S\left(-\omega_{kn} \right) = \gamma.$$
⁽¹⁾

Кинетика вероятностей $\rho_n(t)$ нахождения системы на уровне *n* в момент *t* описывается системой балансных уравнений

$$\frac{d\rho_n}{dt} = \gamma \left(-2\rho_n + \rho_{n+1} + \rho_{n-1} \right).$$
⁽²⁾

Введем переменную $x = \gamma t$ и сделаем подстановку

$$\rho_n = e^{-2x} u(x). \tag{3}$$

Подстановка (3) в (2) приводит к системе уравнений

$$\frac{du_n}{d(2x)} = \frac{1}{2} \left[u_{n+1} + u_{n-1} \right]. \tag{4}$$

Сравнивая это уравнение с известным рекуррентным соотношением для функций Бесселя мнимого аргумента (см. [<u>ГР</u>63], формула 8.486.2),

$$\frac{dI_{\nu}}{dz} = \frac{1}{2} (I_{\nu-1} + I_{\nu+1}), \qquad (5)$$

Д [<u>ГР</u>63] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик

Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: - Физматгиз, 1963.

мы можем сразу же записать решение, соответствующее начальным условиям, при которых в момент t = 0 заселен только один уровень $|n\rangle$:

$$\rho_k(t) = e^{-2\gamma t} I_{n-k}(2\gamma t).$$
(6)

На рисунках на следующей странице показана зависимость от времени населенностей начального и ближайших соседних уровней гармонического осциллятора под действием широкополосного поля. Поскольку при $z \gg 1$ и $z \gg n$

$$e^{-z}I_n(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}},\tag{7}$$

при больших временах вероятности уменьшаются по корневому закону. Естественно, ширина полосы существенно заселенных состояний растет со временем по корневому – т.е. диффузионному – закону.





Изменение дисперсии энергии системы

$$\Delta E^{2}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\hbar \omega k)^{2} \rho_{n}(t) = 2(\hbar \omega)^{2} \gamma t$$
(8)

имеет в точности диффузионный характер (ср. 7.23).

§ 15.3 Поглощение при переходах в широкополосном поле

• Рассмотрим эволюцию состояний одномерной нелинейной системы в квазиклассическом состоянии под действием широкополосного шума. Выведем кинетическое уравнение для плотности распределения системы по энергии. Будем описывать систему вероятностями ρ_n нахождения системы в *n* стационарном состоянии. Считая возможными только переходы на соседние уровни, получим систему балансных уравнений в виде

$$\frac{d\rho_n}{dt} = -\rho_n \dot{W}_{n-} - \rho_n \dot{W}_{n+} + \rho_{n+1} \dot{W}_{n+} + \rho_{n-1} \dot{W}_{n-}$$
(9)

где $\dot{W}_{n\pm}$ - скорости переходов с *n*-го уровня вверх и вниз. При записи уравнения (9) нами учтен принцип детального равновесия: $\dot{W}_{n+} = \dot{W}_{(n+1)-}$. Будем далее считать аргументом ρ не номер уровня, а его энергию, $\rho_n \to \rho(E_n)$. В квазиклассическом случае

$$E_{n\pm 1} = E_n \pm \Delta_{\pm} = E_n \pm \hbar \Omega \bigg(E_n \pm \frac{\hbar \Omega}{2} \bigg), \tag{10}$$

где $\Omega(E)$ - частота движения классической системы при энергии E. Будем считать $\rho(E)$ плавной функцией, и разложим ее в ряд Тейлора до квадратичных по Δ_{\pm} членов. Тогда балансное уравнение принимает вид уравнения в частных производных

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\Delta_{+} \dot{W}_{+} - \Delta_{-} \dot{W}_{-}\right) \frac{\partial \rho}{\partial E} + \frac{1}{2} \left(\Delta_{+}^{2} \dot{W}_{+} + \Delta_{-}^{2} \dot{W}_{-}\right) \frac{\partial^{2} \rho}{\partial E^{2}}.$$
 (11)

Выражение для *W* определяется золотым правилом Ферми для переходов в широкополосном поле:

$$\dot{W}_{n\pm} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{n,n\pm 1}|^2 S(\omega_{n,n\pm 1})$$
(12)=(4.24)

Величина матричного элемента оператора возмущения в квазиклассическом случае может быть заменена на фурье-амплитуду первой (при сделанных ограничениях) гармоники классического выражения, соответствующего оператору возмущения, при невозмущенном движении:

$$V_{n,n\pm 1} \rightarrow V_1 \left(E_n \pm \frac{\hbar\Omega}{2} \right).$$
 (13)

Спектральную плотность $S(\omega)$ в дальнейшем для упрощения считаем постоянной, $S(\omega) = 1$ (тем самым полагая широкополосное поле белым шумом; от этого предположения можно позже отказаться – но, конечно, ценой усложнения выражений).

Раскладывая выражения (10) и (13) до членов первого порядка по *ћ* (в аргументе), и подставляя разложения в (11), получаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2\pi \Omega \frac{\partial}{\partial E} \left(V_1^2 \Omega \right) \frac{\partial \rho}{\partial E} + 2\pi V_1^2 \Omega^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial E^2}.$$
 (14)

Перейдем теперь к классической функции распределения по энергии w(E): она связана с вероятностью нахождения системы на данном уровне $\rho(E)$ соотношением

$$w(E) = \frac{\rho(E)}{\hbar\Omega(E)}.$$
(15)

Уравнение для w(E) принимает вид

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D_1(E) \frac{\partial}{\partial E} (w\Omega) \right), \tag{16}$$

где коэффициент энергетической диффузии первого порядка есть

$$D_1(E) = 2\pi V_1^2(E)\Omega(E).$$
 (17)

Совершенно так же можно учесть переходы с изменением квантового числа на *k*. Коэффициент энергетической диффузии первого порядка есть

$$D_k(E) = 2\pi k^2 V_k^2(E) \Omega(E)$$
(18)

Поскольку переходы на разные уровни происходят независимо, коэффициенты диффузии можно просуммировать и записать окончательное кинетическое уравнение энергетической диффузии в виде

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \left(D(E) \frac{\partial}{\partial E} (w\Omega) \right), \tag{19}$$

где

$$D(E) = 2\pi \Omega(E) \sum_{k=1}^{\infty} k^2 V_k^2(E).$$
 (20)

Существенно, что формулы (19) и (20) не содержат постоянной Планка *ћ*. Выражению для коэффициента диффузии можно придать вид

$$D(E) = \frac{1}{2} \int_{0}^{2\pi/\Omega(E)} \left(\frac{dV(E)}{dt}\right)^2 dt.$$
 (21)

Величина D(E) без труда может быть найдена численно - при каждом значении энергии достаточно вычислить закон движения на одном периоде.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #16 ТЕОРИЯ РЕЛАКСАЦИИ

§16.1 Релаксация

Термин «релаксация» (от латинских *re* – «вновь», *laxare* – «расслабляться») был введен в физику Дж.К. Максвеллом в 1866 г. для обозначения процесса установления равновесия в жидкости после исчезновения приложенных к ней сил [<u>ЛЛ</u>VII, §35]. За прошедшие годы область значений термина сильно расширилась. Сейчас им обозначают почти любые процессы, ведущие к установлению состояния равновесия (например, в теории колебаний релаксационными называют движения, монотонно стремящиеся к стационарным значениям).

В квантовой радиофизике под релаксацией имеют в виду процессы взаимодействия квантовой системы S с ее окружением E. Целью этого раздела теории является построение замкнутой системы уравнений, позволяющей решить задачу об эволюции системы S в присутствии окружения E, в том числе при наличии внешнего поля F_1 . Такое построение возможно только приближенно, ценой ряда упрощений, позволяющих исключить переменные, описывающих эволюцию окружения – от взаимодействия с E зависят параметры, но не динамические переменные системы замкнутой системы. Одним из упрощений является предположение о том, что окружение E является большой системой, имеет много степеней свободы. Часто также можно считать E находящимся в состоянии термодинамического равновесия; поэтому в задачах релаксации E называют *термостатом*.

Считая термостат большим и рассматривая его движение как заданное, мы можем попытаться описать релаксацию как результат воздействия на *S* внешнего поля с непрерывным частотным спектром.

Простейшая модель такого типа – двухуровневая система в шумовом поле – описывается системой уравнений для населенностей

$$\dot{N}_{1} = -\dot{W}N_{1} + \dot{W}N_{2}, \dot{N}_{2} = \dot{W}N_{1} - \dot{W}N_{2},$$
(1)

где \dot{W} - постоянная фермиевская скорость перехода

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{12}|^2 S(\omega_{12}).$$
(2)

Равновесным состоянием такой модели является состояние, в котором населенности нижнего и верхнего уровней равны, $\frac{N_1}{N_2} = 1$. Этот результат не зависит от предположений о спектральных свойствах широкополосного поля – решающим является то обстоятельство, что оно считается заданным, не зависящим от состояния системы *S*.

Между тем введенная Эйнштейном (1916) феноменологическая модель эволюции населенностей

$$\dot{N}_{1} = -B\rho(N_{1} - N_{2}) + AN_{2},$$

$$\dot{N}_{2} = B\rho(N_{1} - N_{2}) - AN_{2}$$
(3)

приводит к стационарному значению

$$\frac{N_1}{N_2} = \left(1 + \frac{A}{B\rho}\right) \tag{4}$$

которое может сколь угодно сильно отличаться от единицы – в согласии с экспериментальными данными.

Следовательно, для построения теории релаксации нужно использовать приближения, которые учитывали бы обратное влияние *S* на термостат.

§ 16.2 Матрица плотности

• Поскольку в общем случае ВФ системы S + E не распадается на произведение ВФ подсистем S и E, приписать подсистеме S состояние как вектор гильбертова пространства невозможно. Для формулировки замкнутого описания эволюции системы, взаимодействующей с окружением, необходимо использовать формализм матрицы плотности.

• *Матрицей плотности* $\hat{\rho}$ замкнутой квантовой системы в счетном базисе { ϕ_n } называется эрмитова матрица с элементами ρ_{mn} , обладающая свойствами

$$\operatorname{Sp}\hat{\rho} \equiv \sum_{n} \rho_{nn} = 1, \quad \rho_{nn} \ge 0 \quad (\forall n).$$
 (5)

Последнее свойство должно выполняться в любом базисе, что влечет неравенство

$$\left|\rho_{mn}\right|^{2} \leq \rho_{mm}\rho_{nn} \quad (\forall m,n).$$
 (6)

Если \hat{Z} - произвольный оператор, имеющий в базисе { ϕ_n } матричные элементы Z_{mn} , то среднее значение физической величины Z в состоянии с матрицей плотности $\hat{\rho}$ дается формулой

$$\overline{Z} = \sum_{m,n} Z_{mn} \rho_{nm} \equiv \operatorname{Sp}(\hat{Z}\hat{\rho}).$$
⁽⁷⁾

Эта величина не зависит от выбора базиса.

• Состояния, в которых матрица плотности удовлетворяет соотношению

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}, \tag{8}$$

называются *чистыми*; таким состояниям может быть сопоставлена ВФ. Компоненты *P*,*Q* и *R* вектора Блоха двухуровневой системы (см. §10.2)

$$P = A^*B + AB^*, \quad Q = i(A^*B - AB^*), \quad R = |B|^2 - |A|^2.$$
(10.12)

связаны с элементами матрицы плотности чистого состояния соотношениями

$$\rho_{11} = \frac{1+R}{2}, \quad \rho_{12} = \frac{P+iQ}{2}, \quad \rho_{22} = \frac{1-R}{2}$$
 (9)

Эти соотношения мы будем в дальнейшем использовать как определения компонент вектора Блоха двухуровневой системы и в смешанных состояниях.

• Для описания эволюции системы следует принять, что уравнение движения для матрицы плотности системы с гамильтонианом \hat{H} имеет вид

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]. \tag{10}$$

Если в качестве базиса $\{\phi_n\}$ используются собственные функции гамильтониана \hat{H} , (матрица гамильтониана диагональна), то уравнение ($\dot{\rho}$) решается элементарно:

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(0) \exp(-i\omega_{nm}t). \tag{11}$$

В частности, диагональные матричные элементы, определяющие вероятности найти систему в состоянии φ_n, постоянны.

 \Rightarrow Задача. Пусть на двухуровневую систему \hat{H} наложено постоянное возмущение \hat{V} , так что матрица гамильтониана в базисе $\{\varphi_n\}$ имеет вид

$$\hat{H} = \begin{vmatrix} \omega_1 & V \\ V & \omega_2 \end{vmatrix}.$$
 (12)

Найти для этой системы зависимость $\rho_{mn}(t)$.

§ 16.3 Усреднение закона движения матрицы плотности: неоднородное уширение

• Формализм матрицы плотности открывает путь к вычислению законов эволюции наблюдаемых подсистемы. Следует решить уравнения для матрицы плотности $\rho(t)$ для системы S + E и усреднить найденное решение по переменным, относящимся к подсистеме E. Оставшееся выражение для $\rho_S(t)$ позволяет вычислить все наблюдаемые величины, относящиеся к подсистеме S. Такая программа может быть реализована только в самых простых случаях.

• Рассмотрим простейший пример - двухуровневую подсистему S, находящуюся в контакте с окружением E, взаимодействие с которым имеет только диагональные матричные элементы, изменяющие частоту перехода ω_{21} . Такое изменение частоты перехода (и излучения), при котором частоты разных атомов имеют определенные значения, различающиеся между собой, называют *неоднородным уширением линии*. Уравнения движения для элементов матрицы плотности имеют вид

$$i\frac{d\rho_{11}}{dt} = 0, \quad i\frac{d\rho_{22}}{dt} = 0,$$
(13)
$$i\frac{d\rho_{12}}{dt} = \omega_{12}\rho_{12} + \Delta_N\rho_{12}.$$

Величина сдвига уровней $\Delta_N = V_{11,N} - V_{22,N}$ зависит от того, в каком состоянии Ψ_N находится окружение E. Уравнения для медленных компонент вектора Блоха имеют вид

$$\dot{\boldsymbol{U}} = -\Delta \boldsymbol{V}, \quad \dot{\boldsymbol{V}} = \Delta \boldsymbol{U}, \quad \dot{\boldsymbol{W}} = 0.$$
(14)

Их решения

$$u = u_0 \cos \Delta t - v_0 \sin \Delta t, \ v = v_0 \cos \Delta t + u_0 \sin \Delta t, \ w = w_0.$$
(15)

Пусть распределение $g(\Delta)$ можно считать непрерывным (это важно!) и заданным, например, функцией

$$g(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta^2}} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{2\delta^2}\right).$$
 (16)

Усредняя решение $u(\Delta, t)$ по распределению $g(\Delta)$, получаем

$$\overline{u}(t) = u_0 \exp\left(-\frac{\delta^2 t^2}{2}\right).$$
(17)

Таким образом, средний по ансамблю вектор поляризации системы убывает со временем. Закон убывания зависит от деталей формы распределения $g(\Delta)$, но в целом скорость релаксации Г примерно равна ширине δ спектрального распределения $g(\Delta)$. Воздействие окружения на нулевой частоте (заданное постоянными матричными элементами) ведет к затуханию средних значений недиагональных компонент матрицы плотности, связанных с поперечными компонентами вектора Блоха. Это явление называется *поперечной релаксацией*.

★ Рассмотренная выше модель применима к описанию доплеровского уширения линий в газах, если в качестве "окружения" рассматривать поступательные степени свободы излучающих атомов (молекул). Распределение частот имеет гауссов вид с шириной

$$\delta_D = \omega_{21} \sqrt{\frac{kT}{Mc^2}} \tag{18}$$

где *M* - масса атома. Для массы атома $M = 40m_p$ (~ калий) и комнатной температуры (T = 300 K, $kT = 4.14 \cdot 10^{-14}$ эрг) имеем $\delta_D = 8.3 \cdot 10^{-7} \omega_{21}$. В оптическом диапазоне ($\omega_{21} \sim 3 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$) доплеровская ширина линии $\delta_D \sim 2.5 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$.

§ 16.4 Построение уравнений для матрицы плотности подсистемы: общая схема

◆ Практически рецепт усреднения закона движения матрицы плотности системы по состояниям окружения, использованный в § 16.3, мало эффективен. В гамильтониане системы может быть порядка 10²³ переменных, и решить уравнения для матрицы плотности не удастся. Более эффективным является способ получения приближенных уравнений для элементов матрицы плотности подсистемы, в которой взаимодействие с окружением учтено некоторыми эффективными константами.

★ Это переносит в квантовую теорию хорошо известные в классической механике методы построения уравнений эволюции систем с диссипацией: простейший пример - линейный осциллятор с вязким трением с уравнением движения

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0. \tag{19}$$

• Опишем вкратце схему получения уравнений для матрицы плотности подсистемы. Далее мы полагаем $\hbar \equiv 1$. Пусть исходная система имеет гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_{S}(q) + \hat{H}_{E}(Q) + \hat{U}_{SE}(q,Q).$$
(20)

Для нее можно ввести матрицу плотности $\hat{\sigma} = \sigma_{ik,MN}$ (малые индексы нумеруют состояния базиса *S*, большие – базиса *E*). Удобно в качестве базиса взять стационарные состояния гамильтонианов подсистем *S* и *E*, и работать в представлении взаимодействия:

$$\widetilde{\sigma} = \exp i (H_S + H_E) t \cdot \hat{\sigma} \cdot \exp - i (H_S + H_E) t.$$
(21)

Уравнение движения для матрицы плотности системы принимает вид

$$\frac{d\widetilde{\sigma}}{dt} = -i \left[\widetilde{U}, \widetilde{\sigma} \right], \tag{22}$$

где \tilde{U} есть оператор взаимодействия подсистем *S* и *E*, взятый в представлении взаимодействия. Превращение этого уравнения в уравнение движения для матрицы плотности $\hat{\rho}$ подсистемы *S* ($\hat{\rho}_{ik} = \text{Sp}_E \hat{\sigma}$) составляет основу первого приближения теории релаксации. Ниже излагается общая схема такого вывода, в основном следующая построениям пионерской работы [WB53].

[WB53] R. K. Wangsness and F. Bloch The Dynamical Theory of Nuclear Induction Phys. Rev., 1953, v. 89, no. 4, p. 728–739

Расчеты по этой схеме приведены также в книгах [Φ 72, с.123-136; <u>А</u>77, с.190-200].

- □ [<u>Ф</u>72] Файн В.М. Квантовая радиофизика. Том 1. Фотоны и нелинейная оптика. - М.: "Сов. Радио", 1972. - 472 с.
- [<u>А</u>77] Апанасевич П.А. Основы теории взаимодействия света с веществом. -Минск, "Наука и техника", 1977. - 496 с.

• При рассмотрении релаксации мы не учитываем влияние внешнего поля F_1 , предполагая, что его можно добавить непосредственно в усредненные уравнения. Такой подход оправдан, если влияние внешнего поля на систему достаточно мало в том смысле, что слабо сказывается на взаимодействии системы с термостатом.

• Основные этапы преобразования таковы.

Уравнение для эволюции в представлении взаимодействия представляется в интегральной форме,

$$\widetilde{\sigma} = -i \int \left[\widetilde{U}(t'), \widetilde{\sigma}(t') \right] dt', \qquad (23)$$

Это выражение подставляется в правую часть уравнения движения (22) для матрицы плотности системы:

$$\frac{d\widetilde{\sigma}}{dt} = -\int \left[\widetilde{U}(t), \left[\widetilde{U}(t'), \widetilde{\sigma}(t') \right] \right] dt.$$
(24)

В результате под интегралом в правой части возникают билинейные по матричным элементам оператора взаимодействия \tilde{U} члены, которые удобно оценивать и усреднять.

Ф. Проводится факторизация матрицы плотности системы на произведение матриц плотности подсистемы и окружения: $\tilde{\sigma} = \tilde{\rho} \cdot \tilde{P}$. Вводится постулат о том, что матрица плотности окружения - термостата \tilde{P} известна, не зависит от состояния рассматриваемой подсистемы *S* и имеет диагональную форму:

$$P_{MN} = w_N \delta_{MN} \,. \tag{25}$$

②. Проводится усреднение интегро-дифференциального уравнения по состояниям термостата ($\hat{\rho}_{ik} = \mathrm{Sp}_E \hat{\sigma}$).

③. Вводится приближение случайных фаз: в правой части под интегралом сохраняются только члены с "авторезонансными" экспонентами.

④. Принимается, что корреляции матричных элементов оператора взаимодействия затухают быстро в сравнении со скоростью изменения матричных элементов матрицы плотности. Это позволяет превратить интегро-дифференциальное уравнение в дифференциальное с постоянными коэффициентами.

★ Пример. Если в качестве термостата выступает фононная подсистема (колебания решетки кристалла), то время затухания корреляций можно оценить как период колебаний с максимальной - дебаевской - частотой: $\tau \sim \omega_D^{-1} \sim 10^{-13}$ с. Характерную скорость изменения матричных элементов можно оценить частотой Раби: $\dot{\rho}/\rho \sim \Omega_s \sim 10^{12}$ с⁻¹. Таким образом, в стандартных условиях неравенство $\tau(\dot{\rho}/\rho) \ll 1$ выполняется, но с небольшим запасом.

EOL 💿

§ 17.1 Вывод усредненных уравнений

• Отправным пунктом вывода служит интегро-дифференциальное уравнение

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{dt} = -\int \left[\tilde{U}(t), \left[\tilde{U}(t'), \tilde{\sigma}(t')\right]\right] dt'. \qquad (1=16.17)$$

где $\tilde{\sigma}$ - матрица плотности составной системы в представлении взаимодействия. Используя предположенную форму $\tilde{\sigma} = \tilde{\rho} \cdot \tilde{P}$ [①], усредним (1) по состояниям термостата. Получаем для $\tilde{\rho} = \operatorname{Sp}_E \tilde{\sigma}$ [②]

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\operatorname{Sp}_{E} \int_{t_{0}}^{t} \left\{ \tilde{U}(t)\tilde{U}(t')\tilde{\sigma}(t') - \tilde{U}(t)\tilde{\sigma}(t')\tilde{U}(t') \right\} dt' + \operatorname{Sp}_{E} \int_{t_{0}}^{t} \left\{ \tilde{\sigma}(t')\tilde{U}(t')\tilde{U}(t) - \tilde{U}(t')\tilde{\sigma}(t')\tilde{U}(t) \right\} dt'.$$
(2)

Удобно ввести операторы

$$F_{ij,kl}^{-}(t,\tau) = \operatorname{Sp}_{E} \tilde{U}_{ij}(t) \tilde{U}_{kl}(t-\tau) \tilde{P}(t-\tau)$$
(3)

$$F_{ij,kl}^{+}(t,\tau) = \operatorname{Sp}_{E} \tilde{P}(t-\tau) \tilde{U}_{ij}(t-\tau) \tilde{U}_{kl}(t).$$
(4)

С их помощью уравнения для матрицы плотности подсистемы S принимают вид

$$\frac{d\tilde{\rho}_{ij}}{dt} = -\sum_{k,l} \int_{0}^{t-\tau} \Gamma_{ij,kl}(t,\tau) \tilde{\rho}_{kl}(t-\tau) d\tau, \qquad (5)$$

где оператор $\Gamma_{ij,kl}$, называемый *релаксационной матрицей*, задан матричными элементами

$$\Gamma_{ij,kl} = \sum_{p} \left(\delta_{ik} F_{lp,pj}^{+} + \delta_{lj} F_{ip,pk}^{-} \right) - F_{lj,ik}^{+} - F_{lj,ik}^{-} .$$
(6)

$$F_{ij,kl}^{+}(t,\tau) = \operatorname{Sp}_{E} \tilde{P}(t-\tau) \hat{U}_{ij} e^{i\hat{H}_{E}\tau} \hat{U}_{kl} e^{-i\hat{H}_{E}\tau} \times \\ \times \exp(-i\omega_{ij}\tau) \exp\left[i\left(\omega_{ij}+\omega_{kl}\right)t\right]$$
(7)

В этом выражении быстро осциллирующими с изменением t членами, которые обращаются в ноль при усреднении уравнения (5) по малому отрезку времени, можно пренебречь в сравнении с независящими от tчленами, для которых $\omega_{ij} + \omega_{kl} = 0$. [③] Такое условие выполняется или при i = j, k = l, или при i = l, k = j. С другой стороны, усреднению по ансамблю состояний термостата может сопутствовать усреднение по ансамблю состояний подсистемы, которое сводится к усреднению множителя $\exp i (\varphi_i - \varphi_j + \varphi_k - \varphi_l)$, составленного из экспонент от φ аз ВФ. Правила отбора оказываются теми же. По этой причине приближение [③] называется *приближением случайных \varphiаз.* Далее, матрицу плотности термостата мы приняли постоянной. Поэтому выражению (7) можно придать вид

$$F_{ij,kl}^{+}(\tau) \approx \operatorname{Sp}_{E} \tilde{P} \hat{U}_{ij} e^{i\hat{H}_{E}\tau} \hat{U}_{kl} e^{-i\hat{H}_{E}\tau} e^{-i\omega_{ij}\tau}$$
(8)

и считать его зависящим только от τ , но не от t. Соответствующее преобразование можно провести и для выражения $F_{ii,kl}^{-}(t,\tau)$.

В итоге система уравнений для элементов матрицы плотности системы S принимает вид

$$\frac{d\tilde{\rho}_{ij}}{dt} = -\sum_{k,l} \int_{0}^{t-\tau} \Gamma_{ij,kl}(\tau) \tilde{\rho}_{kl}(t-\tau) d\tau.$$
(9)

Введем обозначения для отличных от нуля элементов релаксационной матрицы:

$$\gamma_{ij}(\tau) = \Gamma_{ij,ji}(\tau); \quad \eta_{ij}(\tau) = -\Gamma_{jj,ii}(\tau) \quad (i \neq j).$$
(10)

Как следует из определения (6), эти величины связаны соотношением

$$\gamma_{ii} = \sum_{i \neq j} \eta_{ij} \,. \tag{11}$$

С помощью обозначений (10) уравнения для элементов матрицы плотности могут быть переписаны в виде

$$\frac{d\tilde{\rho}_{ij}}{dt} = -\int_{0}^{t-\tau} \gamma_{ij}(\tau) \tilde{\rho}_{ij}(t-\tau) d\tau + \delta_{ij} \sum_{k} \int_{0}^{t-\tau} \eta_{kj}(\tau) \tilde{\rho}_{kk}(t-\tau) d\tau.$$
(12)

Величины γ и η по своему физическому смыслу представляют некоторые комбинации корреляционных функций матричных элементов оператора взаимодействия \tilde{U} . Как почти все корреляционные функции они характеризуются временем убывания θ таким, что при $\tau \gg \theta$ можно считать $\gamma(\tau) \ll \gamma(0)$, $\eta(\tau) \ll \eta(0)$. Если это характерное время мало в сравнении с характерным временем Θ изменения ρ (например, при наличии внешнего резонансного поля можно считать $\Theta \sim \Omega^{-1}$), и $t - \tau \ge \theta$, то можно вынести медленно меняющуюся функцию $\tilde{\rho}$ из-под интегралов в (12) [④]. Система интегро-дифференциальных уравнений (12) превращается в систему линейных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\tilde{\rho}_{ij}}{dt} = -\gamma_{ij}\tilde{\rho}_{ij} + \delta_{ij}\sum_{k}\eta_{ij}\tilde{\rho}_{ij} .$$
(13)

Здесь константы релаксации γ_{ij} и η_{kj} определяются соотношениями

$$\gamma_{ij} = \int_{0}^{\infty} \gamma_{ij}(\tau) d\tau, \quad \eta_{kj} = \int_{0}^{\infty} \eta_{kj}(\tau) d\tau.$$
 (14)

§ 17.2 Интерпретация уравнений

• Рассмотрим уравнение для диагонального элемента матрицы плотности ρ_{ii} - населенности состояния $|i\rangle$

$$\frac{d\rho_{ii}}{dt} = -\gamma_{ii}\rho_{ii} + \sum_{k}\eta_{ki}\rho_{kk}$$
(15)

По определению

$$\eta_{ki} = \int_{0}^{\infty} F_{ki,ik}^{+}(\tau) d\tau + \int_{0}^{\infty} F_{ki,ik}^{-}(\tau) d\tau \qquad (16)$$

Используя зависимость (8), имеем

$$\eta_{ki} = \sum_{N} w_{N} \sum_{J} (U_{ki})_{NJ} (U_{ik})_{JN} \int_{0}^{\infty} e^{i(\omega_{NJ} + \omega_{ki})\tau} d\tau + \sum_{N} w_{N} \sum_{J} (U_{ki})_{NJ} (U_{ik})_{JN} \int_{0}^{\infty} e^{-i(\omega_{NJ} + \omega_{ki})\tau} d\tau$$
(17)

'10

Правой части можно придать эквивалентную форму

$$\eta_{ki} = 2\pi \sum_{N} w_N \sum_{J} \left| U_{ki} \right|_{NJ}^2 \delta \left(\omega_{NJ} + \omega_{ki} \right), \tag{18}$$

в которой легко узнать обобщение золотого правила Ферми (4.26). Величина η_{ki} представляет собой скорость перехода с уровня $|k\rangle$ на уровень $|i\rangle$ (перехода между вырожденными состояниями $|k,N\rangle$ и $|i,J\rangle$). Скорость изменения диагонального матричного элемента ρ_{ii} определяется разностью суммарной скорости перехода из состояния $|i\rangle$ во все другие состояния (см. (11)) и суммы скоростей переходов из всех других состояний в состояние $|i\rangle$.

Важным моментом является зависимость скорости от направления перехода, которое связано с равновесным состоянием термостата. Пусть

$$w_N = Z^{-1} e^{-\frac{\hbar\omega_N}{kT}}.$$
 (19)

Тогда

$$\eta_{ki} = 2\pi \sum_{N,J} Z^{-1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_N}{kT}\right) |U_{ki}|_{NJ}^2 \delta\left(\omega_{NJ} + \omega_{ki}\right)$$
(20)

Поменяв местами индексы і и k, имеем

$$\eta_{ik} = 2\pi \sum_{N,J} Z^{-1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_N}{kT}\right) \left|U_{ik}\right|_{NJ}^2 \delta\left(\omega_{NJ} + \omega_{ik}\right)$$
(21)

Из-за наличия дельта-функций вклад в эти выражения дают только члены, у которых

$$\omega_N = \omega_J - \omega_{ik} \,. \tag{22}$$

Подставляя (22) в (21), получаем

$$\eta_{ik} = 2\pi \sum_{N,J} Z^{-1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_J - \omega_{ik}}{kT}\right) |U_{ik}|_{NJ}^2 \delta\left(\omega_{NJ} + \omega_{ik}\right) =$$

$$= e^{\frac{\hbar\omega_{ik}}{kT}} \left\{ 2\pi \sum_{N,J} Z^{-1} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_J}{kT}\right) |U_{ik}|_{NJ}^2 \delta\left(\omega_{NJ} + \omega_{ik}\right) \right\}$$
(23)

Меняя местами индексы суммирования, получаем

$$\eta_{ki} = \eta_{ik} e^{-\frac{\hbar\omega_{ik}}{kT}}.$$
(24)

Скорость перехода с уменьшением энергии системы *S* больше скорости перехода с ее увеличением.

• Рассмотрим уравнение для недиагонального элемента матрицы плотности ρ_{ij} - меры корреляции амплитуд состояний $|i\rangle$ и $|j\rangle$. населенности состояния $|i\rangle$

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = -\gamma_{ij}\rho_{ij} \,. \tag{25}$$

Недиагональный элемент релаксационной матрицы может быть записан в виде

$$\gamma_{ij}(\tau) = \sum_{k \neq j} F_{jk,kj}^{+}(\tau) + \sum_{k \neq i} F_{ik,ki}^{-}(\tau) + \Phi_{ij}(\tau)$$
(26)

где

$$\Phi_{ij}(\tau) = F_{ii,ii}^{-}(\tau) - F_{jj,ii}^{-}(\tau) + F_{jj,jj}^{+}(\tau) - F_{jj,ii}^{+}(\tau) = \\ = \operatorname{Sp}_{E}\left\{ \left(\tilde{U}_{jj}(0) - \tilde{U}_{ii}(0) \right) \left(\tilde{U}_{jj}(\tau) - \tilde{U}_{ii}(\tau) \right) + \left[\tilde{U}_{ii}(0), \tilde{U}_{jj}(\tau) - \tilde{U}_{ii}(\tau) \right] \right\}$$

Вычисляя интеграл от $\gamma_{ij}(\tau)$, имеем для константы релаксации недиагональных элементов

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k} \left(\eta_{ik} + \eta_{ji} \right) + \xi_{ij} , \qquad (28)$$

где

$$\xi_{ij} = \int_{0}^{\infty} \Phi_{ij}(\tau) d\tau.$$
 (29)

Скорость релаксации недиагонального элемента матрицы плотности ρ_{ij} определяется суммой двух слагаемых. Первое равно половине суммы скоростей переходов из состояний $|i\rangle$ и $|j\rangle$ во все остальные состояния.

(27)

Второе слагаемое ξ_{ij} не связано с наличием переходов: оно содержит интеграл от корреляционной функции сдвига частоты перехода $\Delta \omega_{ij} = \tilde{U}_{jj} - \tilde{U}_{ii}$ и от добавки аналогичной структуры.

§ 17.3 Двухуровневая система с релаксацией

◆ Если подсистема *S* есть двухуровневая система, то геометрическая интерпретация, при которой разность населенностей изображается вертикальной (продольной) компонентой вектора Блоха, а недиагональные компоненты матрицы плотности — его поперечными компонентами (16.9). Поэтому релаксация диагональных матричных элементов приводит к релаксации продольной компоненты — *продольной релаксации*, а релаксация недиагональных компонент — к *поперечной релаксации*. В итоге преобразований получается система уравнений для компонент вектора Блоха (во вращающейся системе)

$$\frac{du}{dt} + \Gamma_2 u = 0, \quad \frac{dv}{dt} + \Gamma_2 v = 0, \quad \frac{dw}{dt} + \Gamma_1 (w - w_0) = 0.$$
(30)

Скорость продольной релаксации Γ_1 равна сумме скоростей перехода между уровнями системы, $\Gamma_1 = \dot{W}_{12} + \dot{W}_{21}$. Равновесная разность населенностей W_0 определяется выражением

$$\mathbf{w}_0 = \frac{\dot{W}_{12} - \dot{W}_{21}}{\dot{W}_{12} + \dot{W}_{21}}.$$
(31)

Если термостат находится в тепловом равновесии, то

$$w_0 = -\text{th}\left(\frac{\hbar\omega_{21}}{kT}\right). \tag{32}$$

Если $T \rightarrow 0$, то продольная релаксация переводит систему в основное состояние.

Скорость поперечной релаксации дается суммой двух слагаемых:

$$\Gamma_2 = \frac{\Gamma_1}{2} + A. \tag{33}$$

Первое слагаемое учитывает вклад резонансных спектральных компонент, дающих также вклад в продольную релаксацию. Второе слагаемое учитывает вклад низкочастотных флуктуаций матричных элементов взаимодействия системы с термостатом. Во многих случаях оно является превалирующим.

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #18 ТЕОРИЯ РЕЛАКСАЦИИ - 3

§ 18.1 Механизмы продольной релаксации

• Энергия кванта оптических частот $\hbar\omega_{21}$ обычно значительно больше тепловой энергии на степень свободы kT. Поэтому для большинства термостатов продольная релаксация имеет характер потери энергии системой. Важнейшим механизмом продольной релаксации является *спонтанное излучение* (соответствующее уширение линии называют *естественным уширением*). Для него скорость продольной релаксации дается выражением

$$\Gamma_1^{sp} = \frac{4}{3} \cdot \frac{\vec{d}^2 \omega^3}{\hbar c^3} = 2\Gamma_2^{sp}, \qquad (1)$$

а равновесная разность населенностей $W_0 = -1$. В стандартных условиях ($d = ea_0$, $\omega = \omega_s$) $\Gamma_1^{sp} = 1.67 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$.

• Воздействие на двухуровневую систему заданного широкополосного внешнего поля может быть описано как релаксация; ее называют *индуцированной релаксацией*. При воздействии заданного поля спектральная плотность является четной функцией частоты. В этом случае

$$\Gamma_1^{ir} = 2 \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{12}|^2 S(\omega_{12}) = 2\Gamma_2^{ir}.$$
 (2)

★ Напомним: для солнечного света и стандартной двухуровневой системы (см. §4.3) $\Gamma_1^{ir} \approx 6 \text{ c}^{-1}$. Если в качестве источника поля используется лазер с несинхронизованными модами и стандартной (среднеквадратичной) частотой Раби $V/\hbar = \Omega_s \approx 10^{12} \text{ c}^{-1}$, то при ширине спектральной полосы излучения $\Delta \omega \approx 2 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1} \approx 100 \text{ см}^{-1}$ скорость индуцированной релаксации $\Gamma_1^{ir} \approx 3 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$ близка к пределу, устанавливаемому приближением ④ в § 17.1.

• Релаксация описывает необратимое поведение системы. Поэтому всякое необратимое поведение системы можно рассматривать как один из видов релаксации. Примером может служить поведение системы, обладающей как дискретным, так и непрерывным энергетическими спектрами и находящейся во внешнем гармоническом поле. В такой системе возможны необратимые процессы фотоионизации. Константу скорости перехода с данного уровня в континуум можно рассматривать как скорость продольной релаксации, свойственной модели *ионизационного уширения*:

$$\Gamma_1^{ib} \approx \left[\alpha\right] a_0^2 \frac{I}{\hbar\omega} \approx 3 \cdot 10^{10} \, c^{-1}. \tag{3}$$

Это уширение может быть обнаружено в экспериментах по рассеянию слабого резонансного излучения в присутствии сильного (ионизующего) излучения.

🛪 Задача. Чему равны температуры термостатов в приведенных трех примерах?

§ 18.2 Механизмы поперечной релаксации: неоднородное уширение

• Динамика поперечной релаксации существенно зависит от двух параметров - характерного частотного сдвига $\delta \approx U/\hbar$, определяющего силу взаимодействия системы с окружением, и характерного времени корреляции матричных элементов взаимодействия системы с термостатом θ . Соотношение между произведением $\delta\theta$ и единицей определяет тип процесса, приводящего к поперечной релаксации. По предположению (Ф) скорость затухания корреляций велика в сравнении со скоростью эволюции элементов матрицы плотности. Последняя может быть оценена как δ (ср. уравнения (16.14)). В результате приходим к условию $\delta\theta \ll 1$ и оценке

$$\Gamma_2 \approx \delta^2 \theta \,. \tag{4}$$

В этом случае **невозможно** экспериментально разделить ансамбль на части с разными частотами перехода. Спектральная полоса должна рассматриваться как свойственная каждому атому. Такое *уширение* называется *однородным*.

• Если $\delta\theta \gg 1$, то *уширение* называется *неоднородным* (ср. § 16.3) и величина Γ_2 по порядку равна спектральному сдвигу:

$$\Gamma_2 \approx \delta.$$
 (5)

В этом случае можно говорить о мгновенном значении частоты перехода и экспериментально отделить ансамбль систем, у которого частоты переходов лежат в некотором интервале Δ , малом по сравнению с шириной полосы δ . Однородное и неоднородное уширения составляют предельные случаи, между которыми возможен непрерывный переход.

★ Рассмотрим важный пример доплеровского уширения. Характерная величина частотного сдвига равна $\delta \sim (v/c)\omega$, где v - скорость теплового движения молекул. Время корреляции спектрального сдвига может быть оценено как время свободного пробега молекул: $\theta \sim (v\sigma n)^{-1}$, где n - число молекул в единице объема, σ - газоки-

нетическое сечения рассеяния молекул. В итоге для величины δθ получаем не зависящее от скорости теплового движения выражение

$$\delta \theta \sim \frac{\omega}{c \sigma n}.$$
 (6)

Взяв типичные значения $\omega = \omega_s = 1.77 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\sigma = 10a_0^2 = 2.80 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ и $n_L = 2.69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (концентрация молекул газа при нормальных условиях), получаем $\delta\theta = 7.5 \gg 1$. Таким образом, при нормальных условиях доплеровское уширение в видимом диапазоне является неоднородным. Однако достаточно перейти в ближний инфракрасный диапазон ($\omega = 0.1\omega_s$) и повысить плотность газа на порядок ($n = 10n_L$), чтобы получить однородное доплеровское уширение с $\delta\theta = 0.075 \ll 1$.

• Оценим значения констант поперечной релаксации для основных ее механизмов. Начнем со случаев "медленного термостата", приводящих к неоднородному уширению линий. Первым примером служит рассмотренный в § 16.3 доплеровский механизм уширения. В стандартных условиях для него мы получили

$$\Gamma_2 \sim \frac{v}{c} \omega \sim 10^9 \,\mathrm{c}^{-1}.\tag{7}$$

• Пусть система двухуровневых атомов образована атомами примеси, внедренными в кристаллическую решетку (модель рабочего вещества твердотельных лазеров). Оценим величину уширения линии перехода из-за взаимодействия атомов примеси между собой. Взаимодействие можно считать диполь-дипольным, $U \approx d^2/r^3$. Характерная величина частотного сдвига

$$\delta \sim \frac{\overline{U}}{\hbar} \sim \frac{d^2}{\hbar \overline{r}^3} \sim \frac{nd^2}{\hbar}.$$
(8)

В типичных условиях ($n \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$) получаем $\delta \sim 10^9 \text{ c}^{-1}$. Время корреляции частотного сдвига θ порядка времени релаксации кристаллической решетки. Последнее чрезвычайно велико (например, у стекол превосходит сотни лет: $\theta \ge 10^9 \text{ c}$). Таким образом, уширение за счет взаимодействия атомов примеси является неоднородным ($\delta \theta \ge 10^{18}$), и его величина

$$\Gamma_2 \sim \delta \sim 10^9 \text{ c}^{-1}.$$
 (9)

Близость численных значений двух констант поперечной релаксации Γ_2 (7) и (8) является случайной.

★ Тот же порядок величины имеет неоднородное уширение, возникающее из-за взаимодействия атома с дефектами решетки ионного кристалла.

§ 18.3 Механизмы поперечной релаксации: столкновительное уширение

• Обратимся теперь к моделям "быстрых термостатов", приводящих к однородному уширению линий. Пусть система двухуровневых атомов образована атомами, движущимися в газообразной среде (модель рабочего вещества газовых лазеров). Оценим величину уширения линии излучения из-за взаимодействия атомов с окружением - движущимися молекулами (*столкновительное уширение*). Во многих случаях потенциал взаимодействия молекул на больших расстояниях можно считать степенным:

$$U(r) = \frac{C}{r^k}.$$
(10)

Показатель степени k может принимать различные значения в зависимости от свойств молекул газа. Важнейшими случаями являются ван-дерваальсово взаимодействие (k = 6), резонансное диполь-дипольное взаимодействие одинаковых атомов (k = 3) и квадруполь-квадрупольное взаимодействие (k = 5). Сдвиг частоты перехода в данный момент времени есть

$$\delta(t) \approx \frac{C}{\hbar r(t)^{k}}.$$
(11)

★ Оценить значение $\overline{r(t)}^{-k}$ так, как это было сделано в параграфе § 18.2, нельзя: расстояния между молекулами меняются со временем, а величина спектрального сдвига частоты перехода сильно зависит от значения r(t).

Оценку для константы поперечной релаксации можно получить из соображений размерности, приняв

$$\Gamma_2 = nF(A, v), \tag{12}$$

где *n* - концентрация молекул, а $A = C/\hbar$. Тогда

$$\Gamma_2 \sim n A^{\frac{2}{k-1}} v^{\frac{k-3}{k-1}}.$$
 (13)

Эту величину можно записать в виде

$$\Gamma_2 \sim n v \sigma_r. \tag{14}$$

Правая часть представляет обратное время "спектроскопического свободного пробега", а σ_r есть сечение "спектроскопического рассеяния". • Конкретизируем задачу. Для атома примеси в буферном газе доминирующим является ван-дер-ваальсово взаимодействие, $U \approx C/r^6$ (k = 6). При этом величина σ_r имеет порядок величины

$$\sigma_r \sim A^{2/5} v^{-2/5} \,. \tag{15}$$

Характерный поперечник спектроскопического столкновения,

$$L = \sqrt{\sigma_r} \sim a_0 \left(\frac{v_0}{v}\right)^{1/5} \sim 6a_0, \qquad (16)$$

намного превосходит размер атома - спектроскопические столкновения намного более вероятны, чем газокинетические. Соответствующая этому поперечнику величина частотного сдвига

$$\delta \sim \frac{A}{L^6} \sim 2 \cdot 10^{-5} \omega_a \approx 8 \cdot 10^{11} c^{-1}.$$
 (17)

Время корреляции взаимодействия можно оценить как типичное время, за которое молекула пролетит расстояние *L*:

$$\theta \sim \frac{L}{v} \approx 1 \cdot 10^{-12} c \,. \tag{18}$$

В обычных условиях $\delta\theta \approx 0.8$: уширение является промежуточным между однородным и неоднородным.

• Если газ состоит из идентичных атомов, то из-за вырождения уровней пары атомов доминирующим является диполь - дипольное взаимодействие

$$U \approx \frac{d^2}{r^3}.$$
 (19)

В этом случае k = 3, и спектроскопическое сечение столкновения не зависит от скорости молекул (а значит, и от температуры газа). Теперь

$$\sigma_r \sim A v^{-1}.$$
 (20)

Поперечник спектроскопического столкновения

$$L = \sqrt{\sigma_r} \sim a_0 \left(\frac{v_0}{v}\right)^{1/2} \sim 85a_0.$$
⁽²¹⁾

Соответствующая этому поперечнику величина частотного сдвига

$$\delta \sim \frac{A}{L^3} \sim 1.6 \cdot 10^{-6} \omega_a \approx 7 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}.$$
 (22)

Время корреляции взаимодействия можно оценить как типичное время, за которое молекула пролетит расстояние *L*:

$$\theta \sim \frac{L}{v} \approx 1.4 \cdot 10^{-11} c.$$
 (23)

В обычных условиях $\delta\theta \approx 1.0$: уширение является промежуточным между однородным и неоднородным. В результате вновь приходим к выражению

$$\Gamma_2 \approx \delta \approx \frac{nd^2}{\hbar} \approx 2.7 \cdot 10^{10} \, c^{-1} \,. \tag{24}$$

★ Выполнение условия $\delta\theta \sim 1$ для разных механизмов столкновительного уширения не случайно. Фактически расстояние *L* - радиус сечения спектроскопического рассеяния - есть граница области, внутри которой набег фазы поляризации $\delta\phi \approx \delta\theta \sim 1$ из-за возмущения велик, а потому столкновение может рассматриваться как полностью сбивающее фазу колебаний поляризации.

EOL 💿

TEST #08

§ 19.1 Механизмы поперечной релаксации: уширение колебаниями решетки

• Обсудим уширение спектральных линий атомов примеси, находящихся в кристаллической решетке, за счет колебаний этой решетки. Оценка снизу времени корреляции проста: оно не может быть меньше обратной дебаевской частоты, $\theta \le \omega_D^{-1} \sim 10^{-13}$ с. Поэтому сразу же можно указать верхнюю границу для ширины однородной линии: $\Gamma_2 \le 10^{13}$ с⁻¹. Качественная картина этого механизма релаксации такова: смещение ионов решетки создает в месте нахождения рассматриваемого атома электрическое поле, вызывающие сдвиг частоты перехода. При данной амплитуде звуковых колебаний вклад смещений в локальное электрическое поле тем больше, чем выше частота волны.

• Потенциальная энергия взаимодействия электрона в атоме примеси с ионом решетки может быть записана в виде

$$U(\vec{r}, \vec{\rho}(t)) = \frac{Ze^2}{\left|\vec{R}_0 + \vec{r} + \vec{\rho}(t)\right|}$$
(1)

где \vec{R}_0 - равновесное расстояние от ядра примесного атома до иона решетки, $\vec{\rho}(t)$ - зависящий от времени радиус-вектор суммарного смещения ионов от равновесного положения, \vec{r} - радиус-вектор электрона относительно ядра. Разложим знаменатель в (1) по степеням отношения $|\vec{r} + \vec{\rho}(t)|/|\vec{R}_0|$. Основной (.) вклад в приводящее к релаксации взаимодействие дает член

$$\breve{U} \approx \frac{Ze^2 \vec{\rho}(t)r^2}{R_0^4}.$$
(2)

Спектральный сдвиг частоты перехода имеет порядок $\delta \approx \langle \vec{U}/\hbar \rangle$, где усреднение проводится по волновой функции примесного атома. Оценим скорость релаксации, считая ее однородной: $\delta\theta \ll 1$ и $\Gamma_2 \sim \delta^2 \theta$. Тепловые колебания решетки можно представить как суперпозицию нормальных мод гармонических колебаний решетки. Если в кристалле распространяется плоская гармоническая волна - нормальная мода смещений $\vec{\rho}(t)$ вида $A_{\omega} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$, то квадрат относительного смещения соседних атомов в среднем равен

$$\left\langle \vec{\rho}^2 \right\rangle \approx \frac{A_{\omega}^2}{2} \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^2,$$
 (3)

где ω_D - дебаевская частота - максимальная частота звуковых волн в твердом теле [<u>ЛЛ</u>V, §66]. Кинетическая энергия атома T_{ω} по теореме о вириале равна половине его полной энергии:

$$T_{\omega} = \frac{MA_{\omega}^2 \omega^2}{2} = \frac{E_{\omega}}{2}.$$
 (4)

При температуре T средняя энергия E_{ω} нормальной моды колебаний решетки звуковой волны частоты ω равна, в соответствии с формулой Планка,

$$E_{\omega} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$
(5)

Это выражение позволяет определить значение A_{ω}^2 и, тем самым, среднеквадратичное значение смещения ионов $\langle \vec{\rho}^2 \rangle$. В результате получаем

$$\Gamma_{2} \sim \left(\frac{Ze^{2}a_{0}^{2}}{R_{0}^{4}\hbar}\right)^{2} \frac{\theta}{M\omega_{D}^{2}} \int \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} S(\omega) d\omega, \qquad (6)$$

где $S(\omega)$ - спектральная плотность звуковых волн. Используем для нее приближение Дебая [<u>ЛЛ</u>V, §66],

$$S(\omega) = 3 \frac{\omega^2}{\omega_D^3} \quad (\omega \le \omega_D), \quad S(\omega) = 0 \quad (\omega > \omega_D). \tag{7}$$

Основной вклад в интеграл (6) дают высокие частоты. Поэтому можно принять $\theta \approx \omega_D^{-1}$. В итоге приходим к оценке

$$\Gamma_2 \sim \left(\frac{Ze^2 a_0^2}{R_0^4 \hbar}\right)^2 \frac{\hbar}{M \omega_D^2} D_3 \left(\frac{T_D}{T}\right),\tag{8}$$

где функция $D_3(x)$ задана интегралом

$$D_3(x) = \frac{3}{x^4} \int_0^x \frac{z^3}{\exp z - 1} dz.$$
 (9)

 \Rightarrow Задача. Исследовать асимптотики функции $D_3(x)$ при малых и больших значениях аргумента.

★ Пример. Рассмотрим рабочее вещество рубинового лазера - ионы хрома Cr^{3+} в корунде Al₂O₃. Используя значение дебаевской температуры для корунда $T_D = \hbar \omega_D / k = 1047 \ K$, для скорости поперечной релаксации за счет взаимодействия

с колебаниями решетки при комнатной температуре (T = 300 K) получаем $\Gamma_2 \approx 8 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$. Экспериментальное значение $\Gamma_2 \approx 2 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. При понижении температуры от 300 K до 80 K скорость релаксации падает на два порядка. При T < 80 K основную роль играет неоднородное уширение, связанное с электростатическим взаимодействием атомов друг с другом и иными неоднородностями кристалла.



★ Приведенный расчет упрощен до рискованности. Он игнорирует вклад недиагональных матричных элементов. Далее, при переходе атома в возбужденное состояние меняется его взаимодействие с соседями в решетке и, соответственно, частота колебаний. Более методично схемы расчета уширения линий примесных атомов рассмотрены в обзоре

[<u>0</u>79] Осадько И.С.

Исследование электронно-колебательного взаимодействия по структурным оптическим спектрам примесных центров УФН, 1979, т.128, вып.1, с. 31-67.

§ 19.2 Теория релаксации: ограничения и оговорки

• Мы получили выражения для констант релаксации в предположении, что система S взаимодействует только с окружением (термостатом) E, но не со внешним полем F_1 . Предположение о том, что оба взаимодействия аддитивны – почти единственный выход, но он нуждается в поддержке и предупреждении о границах применимости.

У этого предположения три стороны. С первой – принимается, что присутствие внешнего поля не влияет на состояние термостата непосредственно. Достаточно часто оно оправдано – например, поле оптической частоты слабо влияет на движение молекул в газе и характер их столкновений.

★ Оценим величину напряженности поля &, при которой такое изменение станет заметно. Под воздействием поля резонансной частоты система (молекула) приобре-

тает дипольный момент \vec{d} . Сила, действующая на диполь в неоднородном электрическом поле электромагнитной волны, есть $f \sim \vec{d}\nabla \vec{E} \sim d\mathcal{E}/\lambda$. Если амплитуда колебаний скорости $v_F = f/m\omega$ сравнима с тепловой скоростью v_T , то воздействие поля на движение и столкновение молекул будет существенным. Тогда из $\mathcal{E} = 2\pi cmv_T d^{-1}$ получаем $\mathcal{E} = 1.3 \cdot 10^{11} \Gamma c$. По существу такая оценка опровергает использованное для ее вывода приближение: в столь сильном поле процесс утратит резонансный характер $(\beta_+ \approx d\mathcal{E}/\hbar\omega \approx 2 \cdot 10^5)$.

Со второй – предполагается, что характер взаимодействия *S* и *E* останется неизменным. Во внешнем поле характерная скорость изменения матричных элементов – порядка частоты Раби Ω , а преобразование интегро-дифференциальных уравнений в дифференциальные было обеспечено предположенной медленностью изменения ρ_{ij} . Таким образом, независимость оправдана, если $\Omega\theta \leq 1$, что накладывает ограничения на величину поля. Увеличение скорости изменений состояний подсистемы, скорее всего, уменьшит влияние термостата.

Далее, под действием гармонического внешнего поля резонансные частоты двухуровневой системы сдвигаются на частоту Раби внешнего поля Ω (см. §12.1). В результате резонансное взаимодействие с термостатом происходит на иных частотах. Для того, чтобы характеристики релаксации заметно не изменились, нужно потребовать малости относительного изменения матричных элементов взаимодействия:

$$\frac{dU}{d\omega} \cdot \frac{\Omega}{U} \ll 1. \tag{10}$$

В большинстве случаев это условие выполняется, пока $\Omega \ll \omega$.

С третьей – предполагается, что состояние термостата не изменится в результате взаимодействия S и E. Обычно все степени свободы термостата E приблизительно равномерно взаимодействуют с подсистемой S. Возможны исключения: например, в сильно неупорядоченных конденсированных веществах (аморфных телах) высокочастотные колебания решетки могут быть локализованы. В этом случае, несмотря на неограниченно большое число степеней свободы фононного термостата, с примесным атомом эффективно взаимодействуют немногие колебательные степени свободы, состояние которых может измениться (прогрев локального термостата).

★ В теории взаимодействия излучения с многоатомными молекулами используется модель, в которой одна из колебательных степеней свободы рассматривается как подсистема S, а остальные колебательные степени свободы образуют термостат E [<u>AK</u>87, c.222 и сл.]. В этом случае также число степеней свободы термостата невелико и следует учитывать возможность изменения их состояний.

[<u>АК</u>87] Акулин В.М., Карлов Н,В. Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике. М.: Наука, 1987, - 312 с.

• Выражения для констант релаксации получены в предположении слабости взаимодействия - в рамках теории возмущений. Если подсистема *S* взаимодействует сразу с несколькими термостатами, то матричные элементы можно считать некоррелированными, и складывать элементы матрицы релаксации и константы скорости релаксации.

ДИНАМИКА СИСТЕМ С РЕЛАКСАЦИЕЙ

§ 19.3 Двухуровневая система с релаксацией: стационарное состояние в гармоническом поле

Уравнения движения для компонент вектора Блоха двухуровневой системы, взаимодействующей с гармоническим внешним полем с частотой Раби Ω и расстройкой Δ в приближении вращающегося поля и во вращающейся системе координат имеют вид:

$$\dot{u} + \Gamma_2 u = -\Delta v,$$

$$\dot{v} + \Gamma_2 v = \Delta u + \Omega w,$$

$$\dot{w} + \Gamma_1 (w - w_0) = -\Omega v.$$
(11)

Эта система характеризуется четырьмя параметрами одинаковой размерности ($\Gamma_1, \Gamma_2, \Delta, \Omega$), поэтому полное ее исследование представляет весьма трудоемкую задачу. Ограничимся простейшими и важнейшими частными случаями.

• По общим принципам исследования динамических систем начнем с исследования стационарных решений. Из первых двух уравнений системы (11) получаем соотношения

$$\mathbf{v} = \frac{\Omega \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} \mathbf{w}, \quad \mathbf{u} = -\frac{\Omega \Delta}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} \mathbf{w}.$$
(12)

Подстановка первого соотношения в третье уравнение (11) дает

$$w = \frac{\Gamma_2^2 + \Delta^2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2 + \Omega^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} w_0.$$
(13)

☆ Задача. Найденные выражения показывают, что система (11) всегда имеет неподвижную точку – и притом только одну. Исследовать устойчивость этой точки и определить ее тип (он определяется наличием комплексных характеристических показателей и знаками их действительных частей). Удобно ввести следующие комбинации параметров модели:

$$z = \frac{\Omega^2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2}, \qquad \xi = \frac{\Omega^2}{\Gamma_1 \Gamma_2}. \tag{14}$$

Квадрат длины вектора Блоха в стационарном состоянии имеет величину

$$S^{2} = W_{0}^{2} \frac{1+z}{\left(1 + \frac{\Gamma_{2}}{\Gamma_{1}}z\right)^{2}}.$$
(15)

Эта величина может в общем случае отличаться от единицы.

★ При рассмотрении эволюции вектора Блоха в заданном поле было показано, что эволюция является унитарной - длина вектора Блоха остается неизменной. Взаимодействие с термостатом есть всего лишь воздействие некоторого внешнего поля - со специфическим несимметричным частотным спектром. Как такое воздействие может нарушить унитарность, присущую исходной модели?

• Усреднение ансамбля векторов единичной длины, но разных направлений не может привести к появлению среднего вектора с длиной больше единичной. Величина W_0 зависит только от температуры термостата - и может быть сделана равной единице. Тогда, раскладывая S^2 по малому параметру z, получаем

$$S^2 \approx 1 + \left(1 - 2\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}\right)z + \dots \tag{16}$$

Поскольку эта величина не должна превосходить единицы, заключаем, что во всех физически допустимых системах между константами поперечной и продольной релаксации должно выполняться соотношение

$$\Gamma_2 \ge \frac{\Gamma_1}{2}.\tag{17}$$

★ Напомним, что при построении теории взаимодействия с термостатом получалось, что вклад быстрых (резонансных) спектральных компонент $\Gamma'_2 = \Gamma_1/2$, а медленные дают еще дополнительный положительный вклад, $\Gamma''_2 = A \ge 0$ (см. §17.2). В итоге неравенство $\Gamma_2 \ge \Gamma_1/2$ получалось из динамической модели. Теперь же видно, что оно появляется как условие физической осмысленности системы уравнений Блоха с константами релаксации.

EOL 🔍

ЛЕКЦИЯ #20 ДИНАМИКА СИСТЕМ С РЕЛАКСАЦИЕЙ- 2 СИЛЬНОЕ ПОЛЕ

§ 20.1 Двухуровневая система с релаксацией: стационарный отклик на гармоническое поле

• Ранее мы нашли стационарные значения поперечных компонент вектора Блоха двухуровневой системы в гармоническом внешнем поле с частотой Раби Ω и расстройкой Δ:

$$\mathbf{v}_{s} = \mathbf{w}_{0} \frac{\Omega \Gamma_{2}}{\Gamma_{2}^{2} (1+\xi) + \Delta^{2}}, \quad u_{s} = -\mathbf{w}_{0} \frac{\Omega \Delta}{\Gamma_{2}^{2} (1+\xi) + \Delta^{2}}, \quad (1)$$

где $\xi = \Omega^2 / \Gamma_1 \Gamma_2$. Рассмотрим теперь зависимость параметров состояния равновесия от расстройки Δ .

Компоненты U_s и V_s определяют поляризацию во вращающейся системе координат. Возвращаясь в неподвижную систему, для компоненты вектора поляризации P получаем

$$P(t) = \frac{u+iv}{2}e^{i\omega t} + \frac{u-iv}{2}e^{-i\omega t}.$$
 (2)

Внешнее поле имеет зависимость от времени

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\mathcal{E}}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right). \tag{3}$$

Таким образом, отклик двухуровневой системы с релаксацией на гармоническое поле оказывается гармоническим - имеющим частоту внешнего поля. Значения U_s и V_s определяют значения действительной и мнимой частей гармонической восприимчивости $\chi(\omega)$:

$$\chi'(\omega) = -w_0 \frac{d^2}{\hbar} \cdot \frac{\Delta}{\Gamma_2^2(1+\xi) + \Delta^2}, \qquad (4)$$

$$\chi''(\omega) = -W_0 \frac{d^2}{\hbar} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_2^2 (1+\xi) + \Delta^2}.$$
(5)

★ Выше мы ввели новый термин - гармоническая восприимчивость. Он необходим потому, что правые части выражений для $\chi'(\omega)$ и $\chi''(\omega)$ зависят от напряженности поля: отклик двухуровневой системы с релаксацией на гармоническое поле в полученном нами приближении является линейным лишь в области $\xi \ll 1$, которой применимость формул (4) и (5) не ограничивается.

• Основной эффект релаксации – уширение линий излучения/поглощения. В слабом поле оно может быть учтено заменой $\Delta \rightarrow \Delta + i\Gamma_2$. Этот результат может быть перенесен и в теорию возмущений: при учете релаксации параметром разложения становится (см. ф-лу (8.3)) величина

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\sqrt{\Delta^2 + \Gamma_2^2}}.$$
 (6)

Воздействие внешнего гармонического поля на квантовую систему с релаксацией может быть описано методами теории возмущений при любой частоте поля, если выполнено условие $\beta_r(0) = \Omega/\Gamma_2 \ll 1$.

★ Если принять, что поперечная релаксация определяется спонтанным излучением, $\Gamma_2 \sim 10^6 \text{ c}^{-1}$, то границе применимости теории возмущений в стандартных предположениях соответствует интенсивность излучения $I \sim 10^{-12} I_s \sim 10^{-4} \text{ Br cm}^{-2}$. Типичным для многих механизмов является значение $\Gamma_2 \sim 10^{10} \text{ c}^{-1}$. В этом случае граница применимости теории возмущений сдвигается до $I \sim 10^{-4} I_s \sim 10^4 \text{ Br cm}^{-2}$, что приблизительно соответствует интенсивности излучения импульсных лазеров со свободной генерацией.

• В более точном приближении величина уширения спектральной линии δ зависит от амплитуды поля - увеличивается с ее ростом:

$$\delta = \Gamma_2 \sqrt{1 + \xi} \,. \tag{7}$$

Эта зависимость хорошо согласуется с экспериментальными данными.



Зависимость ширины линии перехода $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{3/2}$ в атоме натрия от интенсивности резонансного излучения по данным [CD+77]. Сплошная линия – теоретическая зависимость, точки – данные эксперимента.

[CG+77] M. L. Citron, H. R. Gray, C. W. Gabel, and C. R. Stroud, Jr. Experimental study of power broadening in a two-level atom Phys. Rev. A, 1977, v. 16, no. 4, p. 1507–1512

• Оценим для условий описанного выше опыта положение границы области, в которой зависимость ширины линии от амплитуды поля становится существенной, определив ее условием: $\xi = 1$. Принимая для Γ_1 значение, равное скорости спонтанной релаксации, $\Gamma_1 = 3.12 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$, и используя значение матричного элемента $d = 6.38 \cdot 10^{-18} \ C\Gamma C$ (его можно определить из величины Γ_1 и значения резонансной частоты перехода $\omega_0 = 3.20 \cdot 10^{15} \ c^{-1}$), из равенства $\xi = 1$ получаем $\mathcal{E}^* = 7.29 \cdot 10^{-3} \ \Gamma c$ и $I^* = 6.35 \cdot 10^{-3} \ Bm \ cm^{-2}$.

• Рассмотрим адиабатическое приближение, позволяющее в некоторых случаях упростить систему для компонент вектора Блоха. Если $\Gamma_2 \gg \Gamma_1$, то можно заменить *U* и *V* их выражениями (19.12) через *W*, пригодными в стационарном случае. От системы (19.11) останется одно уравнение, описывающее изменение разности населенностей:

$$\dot{w} + \Gamma_1 \left(w - w_0 \right) + \frac{\Omega^2 \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} w = 0.$$
(8)

Это уравнение называется *скоростным*, или *балансным* (аналогичные уравнения рассматривались для многоуровневых систем в § 7.3 и § 15.2). Привлекая золотое правило Ферми для переходов в непрерывный спектр под действием гармонического поля (см. § 3.2), можно интерпретировать эту формулу как выражение для скорости перехода в непрерывный спектр с плотностью состояний

$$\rho(\Delta) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2}.$$
(9)

которая повторяет профиль уширенной линии (в слабом поле). При этой интерпретации уровень энергии дискретного спектра при учете релаксации оказался эффективно размытым в полосу конечной ширины. Таким образом, при условиях $\Gamma_2 \gg \Gamma_1$ и $\Gamma_2 \gg \Omega$ эволюцию двухуровневой системы с релаксацией в гармоническом поле можно описывать балансным уравнением для разности населенностей.

★ Аналогичные уравнения могут быть записаны для многоуровневых систем и являются распространенной моделью для описания кинетики медленных процессов в лазерах.

§ 20.2 Двухуровневая система с релаксацией: перевод системы в состояние, противоположное начальному

• В модели двухуровневой системы без релаксации π -импульс поля резонансной частоты ($\Delta = 0$) переводит систему из основного состояния в возбужденное в точности (см. (10.10)). Рассмотрим влияние релаксации на такой перевод. Выберем механизм спонтанной релаксации (см. §

18.1), для которого $\Gamma_2 = \Gamma_1/2$, $W_0 = -1$. Уравнения (19.11) для компонент вектора Блоха принимают вид

$$\dot{\mathbf{v}} + \frac{\Gamma}{2}\mathbf{v} = \Omega \mathbf{w}, \qquad \dot{\mathbf{w}} + \Gamma(\mathbf{w}+1) = -\Omega \mathbf{v}.$$
 (10)

Эта система сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\ddot{w} + \frac{3\Gamma}{2}\dot{w} + \left(\Omega^2 + \frac{\Gamma^2}{2}\right)\dot{w} + \frac{\Gamma^2}{2} = 0.$$
(11)

Характеристические показатели этого уравнения

$$\lambda_{1,2} = -\frac{3\Gamma}{4} \pm \sqrt{\frac{\Gamma^2}{16} - \Omega^2} \equiv -\gamma \pm i\tilde{\Omega}.$$
 (12)

Общее решение можно взять в виде

$$\dot{w}(t) = Ae^{-\gamma t}\cos\tilde{\Omega}t + Be^{-\gamma t}\sin\tilde{\Omega}t + \alpha$$
(13)

и подобрать константы A, B и α так, чтобы выполнялись начальные условия w(0) = -1 и $\dot{w}(0) = 0$. Тогда

$$A = \frac{-2\tilde{\Omega}^2}{2\tilde{\Omega}^2 + \gamma^2}, \quad B = \frac{\gamma}{\tilde{\Omega}}A, \quad \alpha = -1 - A = \frac{-\gamma^2}{2\tilde{\Omega}^2 + \gamma^2}.$$
(14)

Наличие релаксации не позволяет с достоверностью перевести систему резонансным полем из основного в возбужденное состояние.



Зависимость населенности верхнего уровня двухуровневой системы от времени при $\Gamma/\Omega = 0.1$

Если $\Gamma/\Omega \ll 1$, то с точностью до первого порядка

$$\max w_2 \approx 1 - \frac{3}{8} \pi \frac{\Gamma}{\Omega} \tag{15}$$

(см. рисунок).
СИЛЬНОЕ ПОЛЕ

§ 20.3 Концепция сильного поля

• В предыдущих разделах описание эволюции квантовой системы с дискретным спектром строилось на разложении ВФ по базису СФ невозмущенного гамильтониана системы. Такой подход эффективен, если внешнее поле мало по сравнению со внутриатомным электрическим полем. Во многих экспериментальных ситуациях это условие выполнено. Характерный атомный масштаб поля

$$\mathcal{E}_a = \frac{e}{a_0^2} = \frac{m^2 e^5}{\hbar^4} = 1.72 \cdot 10^7 \ \Gamma c \tag{16}$$

и неравенство $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_a$ обеспечивает правомерность подхода.

• Нарушить неравенство $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_a$ можно тремя способами.

О Грубой силой: увеличением интенсивности лазерного излучения (см. L01 о современном рекорде пиковой интенсивности лазерного излучения). При этом могут пострадать и другие детали развиваемой нами схемы - в частности, предположение о применимости нерелятивистского приближения для описания невозмущенного атома.

★ При движении свободного электрона в поле плоской электромагнитной волны в нерелятивистском приближении амплитуда колебаний скорости достигнет скорости света при значении напряженности поля $\mathcal{E}_c = m\omega ce^{-1} = 1.01 \cdot 10^8$ Гс. Для отношения этой величины к атомному масштабу напряженности поля получаем

$$\frac{\mathcal{E}_c}{\mathcal{E}_a} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\omega}{\omega_a} \right). \tag{17}$$

Выполнение условий применимости нерелятивистского приближения $\mathscr{E} \ll \mathscr{E}_c$ в сильном поле $\mathscr{E} \gg \mathscr{E}_a$ возможно только в высокочастотных полях $\omega \gg 10^2 \omega_a$.

② Увеличением среднего расстояния атомного электрона от ядра. Например, в ридберговском состоянии с большим главным квантовым числом $n \gg 1$ среднее расстояние электрона от ядра $a \sim a_0 n^2$, и характерное значение поля $\mathcal{E}_n \sim \mathcal{E}_a n^{-4}$.

★ В состоянии с n = 100 характерное значение $\mathcal{E}_n \sim 10^{-8} \mathcal{E}_a \sim 0.1$ Гс, что соответствует интенсивности излучения $I_n \sim 1$ Вт см⁻². Частота орбитального движения в этом состоянии $\omega_n \sim n^{-3}\omega_a \sim 4 \cdot 10^{10}$ с⁻¹ лежит в хорошо освоенном диапазоне сантиметровых волн.

Э Уменьшением эффективного заряда ядра.

★ Например, электрон над поверхностью жидкого гелия [<u>Э</u>80] притягивается к ней силами взаимодействия с электростатическим изображением. Потенциал такого взаимодействия имеет вид

$$U(r) = -\frac{e^2}{2r} \cdot \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2},\tag{18}$$

где ε - диэлектрическая проницаемость. Для жидкого гелия $\varepsilon - 1 = 4.5 \cdot 10^{-2}$, что соответствует уменьшению эффективного заряда (и соответствующего характерного поля) на порядок.

(<u>Э</u>80] - Эдельман В.С.

Левитирующие электроны УФН, 1980, т. 130, вып. 4, с. 675-706.

• Сказанное выше относится к электронам в состояниях дискретного спектра. Для состояний непрерывного спектра соответствующий \mathcal{E}_a масштаб равен нулю. До сих пор состояния непрерывного спектра (например, в теориях фотоионизации, L04 и L09) мы рассматривали, описывая их ВФ свободной частицы - решениями УШ в полном пренебрежении внешним полем. Вопрос о правомерности такого подхода требует отдельного рассмотрения.

• Принципиальная основа рассматриваемых ниже методов состоит в использовании в качестве нулевого приближения модели, описывающей электрон в поле электромагнитной волны, и учитывающей по возможности точно эффекты взаимодействия электрона со внешним полем. Взаимодействие электрона с ядром (или атомным остатком) будет учитываться как возмущение.

§20.4 Свободный электрон в поле волны

• Поле плоской электромагнитной волны опишем моделью переменного электрического поля (самой простой из рассмотренных в § 1.3)

$$\vec{E}(t) = \vec{E}\cos\omega t, \quad \vec{H}(t) = 0.$$
(19)

Такое поле может быть описано однородным в пространстве векторным потенциалом

$$\vec{A}(t) = -\frac{c}{\omega}\vec{E}\sin\omega t.$$
 (20)

☆ Описанному подходу есть очевидная альтернатива - перенести все взаимодействие на скалярный потенциал. Почему мы ей не пользуемся?

'10

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 \Psi.$$
 (21)

Гамильтониан не содержит пространственных координат, поэтому импульс электрона является интегралом движения. Подставляя решение в виде

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathscr{N} \exp i \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} \cdot \varphi(t), \qquad (22)$$

для функции $\phi(t)$ получим уравнение первого порядка с разделяющимися переменными, которое элементарно интегрируется. В итоге для зависящей от времени части ВФ получаем выражение

$$\varphi(t) = \exp\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} t - \frac{e\vec{p}\vec{E}}{m\omega^2} \cos\omega t + \frac{e^2\vec{E}^2}{4m\omega^2} \left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) \right].$$
(23)

• Решение (23) по форме представляет собой волновую функцию *ква*зиэнергетического состояния свободного электрона (см. § 12.1). Величина квазиэнергетического сдвига,

$$\Delta E = \frac{e^2 \vec{E}^2}{4m\omega^2},\tag{24}$$

в стандартных условиях пренебрежимо мала в сравнении с энергией кванта поля: $\Delta E_s = 1.69 \cdot 10^{-17}$ эрг = $= 1.0 \cdot 10^{-5}$ эВ. Подметим, однако, что сдвиг ΔE неограниченно растет при уменьшении частоты поля.

• Периодически зависящая от времени часть ВФ КЭС может быть разложена в ряд Фурье. Каждое слагаемое со временной зависимостью вида $\exp(\pm in\omega t)$ может интерпретироваться как компонента, в которой энергия электрона отличается от его средней квазиэнергии на несколько ($\mp n\hbar\omega$) квантов энергии поля.

★ В использованном приближении рассеяния света на свободном электроне нет. Сохранение импульса электрона приводит к тому, что среднее значение дипольного момента в данном состоянии не зависит от времени, а переходы в состояния с другими значениями импульса невозможны. Однако построенная ВФ может быть использована для рассмотрения задач, в которых частица взаимодействует не только со внешним полем.

TEST #09

§ 21.1 Метод стационарной фазы

• Вид ВФ квазиэнергетических состояний электрона в поле волны

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathscr{N} \exp i \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} \cdot \varphi(t) \tag{1}$$

$$\varphi(t) = \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} t - \frac{e\vec{p}\vec{E}}{m\omega^2} \cos \omega t + \frac{e^2\vec{E}^2}{4m\omega^2} \left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) \right]$$
(2)

подсказывает, что при решении задач о переходах между такими состояниями предстоит вычисление интегралов от функций вида $\exp i\phi(t)$, в которых $\phi(t)$ есть нелинейная функция времени. В простейшем приближении величина такого интеграла может считаться пропорциональной значению подынтегральной функции в *точке стационарной фазы* t_0 , где $\dot{\phi}(t_0) = 0$:

$$\int \exp i\phi(t)dt \sim \exp i\phi(t_0). \tag{3}$$

★ Отметим аналогию с методом перевала, в котором подынтегральная функция с узким максимумом аппроксимируется гауссовой функцией с той же величиной пика и с тем же поведением вблизи вершины.

Весьма существенно, что точка стационарной фазы в общем случае может соответствовать комплексному значению времени.

★ Для примера рассмотрим интеграл вида

$$\int f(t) \exp i\omega t \, dt \,, \tag{4}$$

важный для нестационарной теории возмущений (см. §2.3, формула (28)) и определяющий спектр импульса f(t). Для гауссова импульса $f(t) = \exp - t^2/2$ фаза есть $\phi(t) = i t^2/2 + \omega t$, и единственная точка стационарной фазы, $t_0 = i\omega$, лежит на мнимой оси. Согласно оценке (3), интеграл равен $\exp i\phi(t_0) = \exp(-\omega^2/2)$, что с экспоненциальной точностью совпадает с точным результатом.

Более точное приближение [$\underline{\Phi}$ 87] учитывает значение второй производной фазы в точке стационарной фазы, $\ddot{\phi}(t_0) = \alpha$. В результате правая часть (3) должна быть домножена на величину

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha z^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp i\frac{\pi}{4}.$$
 (5)

(<u>Ф</u>87] Федорюк М.В.

Асимптотика: Интегралы и ряды.

М.: Наука, 1987. - 544 с. - гл. III.

☆ Задача. Методом стационарной фазы вычислить интеграл (4) с $f(t) = (1+t^2)^{-1}$ и сравнить с точным результатом. В этой задаче две точки стационарной фазы. Какую из них следует выбрать для оценки интеграла?

§ 21.2 Ионизация атомов сильным полем

• Рассмотрим задачу об ионизации атомов переменным однородным электрическим внешним полем $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E} \cos \omega t$ в следующей модели.

①. Начальное состояние системы ψ_i есть единственное состояние дискретного спектра с энергией связи $E_0 = \hbar \omega_0$. Пренебрегая влиянием внешнего поля, примем, что оно описывается ВФ стационарного состояния в отсутствие поля, $\psi_i \equiv \varphi_0$.

2. Конечное состояние системы опишем ВФ квазиэнергетического состояния электрона в поле волны, найденной в § 20.4, $\psi_f \equiv \Psi$ из (20.22), (20.23). При этом мы пренебрегаем влиянием потенциала атомного остатка на электрон в конечном состоянии.

★ По общим правилам теории возмущений, амплитуда перехода дается матричным элементом $M = \langle \psi_i | \hat{C} | \psi_k \rangle$. Что взять в качестве оператора возмущения \hat{C} ? В начальном состоянии точно учтен оператор взаимодействия электрона с атомным остатком \hat{V}_U и отброшен оператор взаимодействия с полем \hat{V}_F . Напротив, в конечном состоянии точно учтен \hat{V}_F и отброшен \hat{V}_U . Из этой симметрии следует, что оператор \hat{C} между обкладками может быть пропорционален единичному (с константой пропорциональности, имеющей размерность энергии - чтобы обеспечить правильную размерность M). Определить величину этой константы можно, рассмотрев случай слабого поля и сравнив его с результатом теории возмущений. Разложим экспоненту в (2) по степеням \mathcal{E} . Нулевой член разложения – единица – не дает вклада в матричный элемент, так как $|\psi_i\rangle$ и $|\psi_k\rangle$ суть СФ гамильтониана невозмущеной системы \hat{H}_0 , соответствующие разным значениям энергии, а потому взаимно ортогональны. Первый член дает

$$M_{ik} = -i \left\langle \Psi_i \left| \frac{e \vec{p} \vec{E}}{\hbar m \omega^2} \cos \omega t \left| \Psi_k \right\rangle \right.$$
(6)

Считая функцию $|\psi_k\rangle$ плоской волной с импульсом \vec{p} , для оператора возмущения *pA*-формы (4.1) получаем

$$V_{ik} = \left\langle \Psi_i \left| \frac{e\vec{p}\vec{E}}{m\omega} \sin \omega t \right| \Psi_k \right\rangle \tag{7}$$

Игнорируя несущественный сдвиг фазы поля, приходим к соотношению $\hat{C} = i\hbar\omega$.

• Итак,

$$M = i\hbar\omega \left\langle \Psi_i \left| \Psi_f \right\rangle.$$
(8)

При расчете скорости однофотонной ионизации в § 3.1, для суммарной скорости перехода в состояния непрерывного спектра было получено выражение

$$\dot{W} = \int d\nu \frac{|V|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{d}{dt} \left| \int \exp i\Delta(\nu) t' \, dt' \right|^2 \right\}$$
(9)

где расстройка $\Delta(v) = [E(v) - E_0]\hbar^{-1}$ зависела от индекса конечного состояния, но не от времени. При использовании в качестве ВФ конечного состояния квазиэнергетической ВФ получаем

$$\dot{W} = \int d\nu \frac{|V|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{d}{dt} \left(\int \exp i \int \Delta(\nu, t'') dt'' dt' \right)^2 \right\}, \qquad (10)$$

где зависящая от времени расстройка дается выражением

$$\Delta(\mathbf{v},t) = \omega_0 + \frac{1}{2m\hbar} \left(\vec{p} + \frac{e}{\omega} \vec{E} \sin \omega t \right)^2.$$
(11)

Основной вклад в скорость переходов дают состояния с малыми конечными импульсами (чем больше \vec{p} , тем быстрее осциллирует подынтегральное выражение и тем меньше интеграл). Положив $\vec{p} = 0$, оценим входящий в (10) интеграл по dt' методом стационарной фазы, где фаза

$$\phi(t) = \int_{0}^{t} \Delta(0, t') dt', \quad \dot{\phi}(t) = \Delta(0, t).$$
(12)

Точки стационарной фазы определяются уравнением

$$\dot{\phi} = \omega_0 + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^2} \sin^2 \omega t = 0.$$
(13)

ИЛИ

$$\sin^2 \omega t = -\frac{2m\hbar\omega^2\omega_0}{e^2 \mathcal{E}^2} = -\gamma^2, \qquad (14)$$

где безразмерный параметр задачи

$$\gamma = \frac{\omega}{e\mathcal{E}}\sqrt{2m\hbar\omega_0} \tag{15}$$

называется *параметром адиабатичности*. Подчеркнем: он обратно пропорционален величине напряженности поля: $\gamma \propto \mathcal{E}^{-1}$.

★ Из шести параметров исходной модели можно построить три безразмерных комбинации. В нашем подходе предполагается, что $\omega \ll \omega_0$ и $\mathscr{E} \ll \mathscr{E}_a$: все контролируется одним безразмерным параметром γ , потому что по двум другим мы находимся в асимптотической области.

• Интерпретируем параметр адиабатичности. Название подсказывает представление γ в виде произведения частоты поля ω на характерное время эволюции системы *T*:

$$\gamma = \omega T, \qquad T = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}{e\mathcal{E}}$$
 (16)

Пусть система, в которой электрон связан короткодействующим потенциалом и имеет энергию $E_0 = -\hbar\omega_0$, помещена во внешнее однородное постоянное электрическое поле с потенциальной энергией $U(x) = -e\mathcal{E}x$. Такая система будет обладать лишь квазистационарными состояниями, так как частица может уйти на бесконечность в результате туннелирования через барьер. Длина барьера

$$L = \frac{\hbar\omega_0}{e\mathcal{E}} \tag{17}$$

Скорость подбарьерного движения V_t можно оценить так:

$$V_t = \sqrt{\frac{2\hbar\omega_0}{m}}.$$
 (18)

Время туннелирования (время подбарьерного движения) можно оценить как отношение длины барьера к характерной скорости подбарьерного движения:

$$T_t \sim \frac{L}{V_t} \sim \frac{\sqrt{m\hbar\omega_0}}{e\mathcal{E}}.$$
 (19)

Оно совпадает (параметрически) со входящим в определение γ характерным масштабом *T*. Итак, параметр адиабатичности пропорционален отношению времени туннелирования T_t к периоду изменения внешнего поля $T_f = 2\pi\omega^{-1}$.

★ Пример. Оценим параметры, соответствующие порогу адиабатичности, $\gamma = 1$. Положим $\omega = \omega_s = 1.77 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, для частоты ионизации примем значение $\omega_0 = 10\omega_s$. Тогда условие $\gamma = 1$ будет выполняться при напряженности поля $\mathcal{E} = 6.8 \cdot 10^5 \Gamma c = 743 \mathcal{E}_s = 0.040 \mathcal{E}_a$, что соответствует интенсивности излучения $I = 5.5 \cdot 10^{13} Bm \ cm^{-2}$.

§ 21.3 Формула Келдыша

• Обратимся теперь к вычислению внутренних интегралов в формуле

$$\dot{W} = \int dv \frac{\left|V\right|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{d}{dt} \left| \int \exp i \int \Delta(v, t'') dt'' dt' \right|^2 \right\}. \quad (20) \equiv (10)$$

Точки стационарной фазы определяются уравнением

$$\sin^2 \omega t = -\frac{2m\hbar\omega^2\omega_0}{e^2 \mathcal{E}^2} = -\gamma^2, \qquad (21)$$

откуда $t = n\pi + i\tau$, где n - целое, а

$$\tau = \frac{1}{\omega} \operatorname{Arsh} \gamma.$$
 (22)

Они эквидистантно расположены вдоль действительной оси. Поэтому величина \dot{W} пропорциональна квадрату модуля вклада от одной такой точки. Вычислим этот вклад для точки $t = i\tau$.

$$\phi_0 = \omega_0 \int_0^\tau \left(1 - \frac{1}{\gamma^2} \operatorname{sh}^2 \omega z \right) dz = \frac{\omega_0}{\omega} \int_0^{\operatorname{Arsh}\gamma} \left(1 - \frac{1}{\gamma^2} \operatorname{sh}^2 x \right) dx.$$
(23)

Интегрирование возможно в элементарных функциях. В результате получаем

$$\dot{W} \sim \exp\left\{-2\frac{\omega_0}{\omega}f(\gamma)\right\}$$
, (24A)

$$f(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2}\right) \operatorname{Arsh}\gamma - \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{2\gamma} \quad (24B)$$

Формула (24) называется формулой Келдыша [К64].

📖 [<u>К</u>64] - Келдыш Л.В.

Ионизация в поле сильной электромагнитной волны ЖЭТФ, 1964, т. 47, вып. 5, с. 1945 - 1957.

• Рассмотрим предельные случаи формулы Келдыша. Если параметр адиабатичности мал, $\gamma \ll 1$, что соответствует сильным и низкочастотным полям, то асимптотика $f(\gamma)$ имеет вид $f(\gamma) \approx 2\gamma/3$ и

$$\dot{W} \sim \exp\left(-\frac{4\omega_0}{3e\mathcal{E}}\sqrt{2m\hbar\omega_0}\right).$$
 (25)

Выражение для скорости ионизации не зависит от частоты поля ω и сохраняет применимость в статическом случае $\omega = 0$. Для такого случая скорость ионизации пропорциональна коэффициенту прохождения через треугольный потенциальный барьер. Этот коэффициент может быть найден методом ВКБ. Вычисление по формуле

$$\dot{W} \sim T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_L}^{x_R} |p(x)| dx\right),$$
 (26)

где

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} = i\sqrt{2m(\hbar\omega_0 - e\mathcal{E}x)}, \qquad (27)$$

приводит в точности к выражению (25). Таким образом, при $\gamma \ll 1$ ионизация имеет характер туннелирования через (почти) стационарный потенциальный барьер и называется *туннельной*.

• Рассмотрим противоположный предельный случай. Если параметр адиабатичности велик, $\gamma \gg 1$, что соответствует слабым и высокочастотным полям, то асимптотика $f(\gamma)$ имеет вид $f(\gamma) \approx \ln 2\gamma$ и

$$\dot{W} \sim \left(\frac{e\mathcal{E}}{\omega\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\right)^{2\frac{\omega_0}{\omega}}.$$
(28)

Сравним это выражение с оценкой скорости многофотонной ионизации, найденной по теории возмущений (9.8):

$$\dot{W} \sim \left(\frac{ea\mathscr{E}}{2\hbar\widetilde{\Delta}}\right)^{2N}.$$
(29)

Зависимость скорости ионизации от напряженности поля оказывается степенной, при этом показатели степени отличаются мало. Роль характерной длины a, оценивающей матричный элемент координаты, в выражении (26) играет размер области локализации частицы в потенциале нулевого радиуса с энергией связи $\hbar\omega_0$:

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \tag{30}$$

Наконец, роль эффективной расстройки играет частота внешнего поля $\tilde{\Delta} = \omega$. Таким образом, при $\gamma \gg 1$ ионизация имеет характер многофотонного поглощения (минимального числа) квантов внешнего поля и называется *многофотонной*. С увеличением напряженности поля при $\gamma \approx 1$ происходит смена многофотонного режима ионизации туннельным.



☆ Задача. Допущение о единственном связанном состоянии системы выполняется, например, для отрицательных ионов (см. § 4.2). В таких системах процесс поглощения энергии поля, сопровождающийся переводом электрона в состояния непрерывного спектра, называется фотоотрывом (photodetachment). В опытах по фотоотрыву электронов наблюдались зависимости скорости процесса, подобные (24). Можно ли считать показанную ниже зависимость подтверждением формулы Келдыша? Если нет – то чем объяснить замедление роста скорости процесса?



[SB+91] H. Stapelfeldt, P. Balling, C. Brink, and H. K. Haugen Excess-photon detachment in the negative gold ion Phys. Rev. Lett., 1991, v. 67, no. 13, p. 1731–1734

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #22 СИЛЬНОЕ ПОЛЕ - 3

§ 22.1 Ионизация в сильном шумовом поле

• Если для ионизации используется многомодовое (квазимонохроматическое) излучение, то при теоретическом описании необходимо учитывать флуктуации амплитуды поля. Процесс излучения с большим числом мод со средней интенсивностью I_0 может описываться как двумерный гауссов процесс с экспоненциальной функцией распределения интенсивности:

$$w(I) = \frac{1}{I_0} e^{-I/I_0}.$$
 (1)

В области применимости теории возмущений скорость ионизации пропорциональна I^K , где K - число фотонов, необходимых для перевода электрона в непрерывный спектр (см. (9.8)). Нелинейность зависимости приводит к существенному увеличению скорости ионизации в шумовом поле в сравнении с монохроматическим полем той же средней интенсивности. Статистический фактор, определяющий величину возрастания, равен

$$g = \frac{\left\langle \dot{W}(I) \right\rangle}{\dot{W}(I_0)} = \frac{1}{I_0^K} \int_0^\infty w(I) I^K dI = K!$$
⁽²⁾

Эта величина может быть очень большой: например, при ионизации атомов ксенона излучением неодимового лазера $g = 11! = 3.99 \cdot 10^7$.

Замедление скорости роста \dot{W} с увеличением интенсивности излучения *I*, вытекающее из формулы Келдыша (§21.3), приводит к уменьшению фактора *g*. Зависимость $g(I_0)$ можно найти, усреднив выражение (21.24) по распределению (1). Удобнее использовать в качестве аргумента величину $x = \gamma^{-1}$, пропорциональную амплитуде поля. Тогда

$$g(x_0) = \int_0^\infty \exp\left\{-2\frac{\omega_0}{\omega} \left[f\left(\frac{1}{x}\right) - f\left(\frac{1}{x_0}\right)\right] - \frac{x^2}{x_0^2}\right\} \frac{2x}{x_0^2} dx$$
(3)

где $x_0 = \gamma_0^{-1}$, а γ_0 есть значение параметра адиабатичности, соответствующее средней интенсивности I_0 . Поскольку основной вклад в интеграл (2) дает окрестность точки $I^* \approx KI_0$, то спадание становится заметным еще в области «в среднем слабых» полей $\gamma \ge 1$.

☆ Задача. Найти аналитический вид зависимости $g(x_0)$, оценив интеграл (3) методом перевала.



Зависимость десятичного логарифма статистического фактора g от десятичного логарифма обратного среднего параметра адиабатичности γ^{-1} для K = 11 (ионизация ксенона излучением неодимового лазера). Кривая – расчет по формуле (3), точки – экспериментальные данные из работ [LM+75] (левая) и [<u>АД</u>+77] (правая).

- [LM+75] C. Lecompte, G. Mainfray, C. Manus, and F. Sanchez Laser temporal-coherence effects on multiphoton ionization processes Phys. Rev. A, 1975, v. 11, no. 3, p. 1009–1015
- [АД+77] Арсланбеков Т.У., Делоне Н.Б., Масалов А.В., Тодирашку С.С., Файнштейн А.Г.
 Многофотонные процессы в поле излучения многомодового лазера.
 ЖЭТФ, 1977, т 72, №3, с 907-917

Несмотря на то, что в экспериментах исследовалась ионизация нейтральных атомов (систем с бесконечным числом связанных состояний), согласие теории и эксперимента удовлетворительное.

§ 22.2 Метод Крамерса - Хеннебергера: общая идея

• По предположению, использованному при выводе формулы Келдыша, у системы есть только одно связанное состояние - электрон связан слабым и короткодействующим потенциалом. Пренебречь влиянием внешнего поля на начальное состояние системы можно в том случае, когда матричный элемент взаимодействия $V = ea \mathcal{E}$ мал в сравнении с энергией связи $E_0 = \hbar \omega_0$. Условие $V \ll E_0$ эквивалентно неравенству

$$\frac{1}{\gamma} \ll \frac{\omega_0}{\omega}.$$
 (4)

Таким образом, для очень сильных полей формула Келдыша неприменима, и необходимо использовать другие подходы. Одним из них является *метод Крамерса — Хеннебергера* [К50,Н68].

- [K50] Kramers H. A., Les Particules Elementaires, Report to the Eighth Solvay Conference, Brusseles: Editions Stoops (1950).
- [H68] Henneberger W.C.
 Perturbation Method for Atoms in Intense Light Beams Phys. Rev. Lett., 1968, v. 21, no. 12, p. 838-841.

• В основе метода лежит следующая эвристическая картина. Рассмотрим классический гамильтониан электрона в присутствии однородного переменного электрического поля и потенциала $U(\vec{r})$,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{\omega} \vec{E} \cos \omega t \right)^2 + U(\vec{r}).$$
 (5)

В нулевом приближении пренебрежем влиянием потенциала $U(\vec{r})$. Закон движения свободного электрона в поле волны имеет вид:

$$\vec{R}(t) = -\frac{e\vec{E}}{m\omega^2} \cos\omega t \,. \tag{6}$$

Перейдем в систему отсчета, связанную с электроном. В этой системе на электрон будет действовать возмущающий потенциал

$$U(\vec{r},t) = U(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)), \tag{7}$$

где $\vec{\alpha}(t) = -\vec{R}(t)$. Этот потенциал можно разложить на две части – постоянный усредненный потенциал

$$U_0(\vec{r}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} U(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)) dt$$
(8)

и зависящее от времени возмущение

$$V(\vec{r},t) = U(\vec{r},t) - U_0(\vec{r}).$$
(9)

Теперь мы можем сформулировать задачу для квантовой модели как задачу об ионизации частицы, находящейся в одном из связанных стационарных состояний в потенциале $U_0(\vec{r})$, под действием нестационарного периодического возмущения $V(\vec{r},t)$.

★ Концепция решения уравнения Шредингера в системе координат, положение которой в пространстве меняется в соответствии с классическим законом движения частицы, использовалась выше при рассмотрении динамики гармонического осциллятора в §13.2.

§ 22.3 Метод Крамерса – Хеннебергера: связь с теорией возмущений

• В методе Крамерса – Хеннебергера влияние сильного поля на атомную систему описывается как задача об ионизации частицы, находящейся в одном из связанных стационарных состояний в потенциале $U_0(\vec{r})$

$$U_0(\vec{r}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} U(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)) dt$$
(10)

под действием нестационарного периодического возмущения $V(\vec{r},t)$

$$V(\vec{r},t) = U(\vec{r},t) - U_0(\vec{r}), \qquad (11)$$

где $\vec{\alpha}(t) = -\vec{R}(t) = -(e\vec{E}/m\omega^2)\cos\omega t$.

• Рассмотрим случай слабого поля. Если $\max |\vec{\alpha}(t)| \rightarrow 0$, то можно разложить потенциал $U(\vec{r} + \vec{\alpha}(t))$ по $\vec{\alpha}$, ограничившись первым членом:

$$U(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)) \approx U(\vec{r}) + \frac{e\vec{E}}{m\omega^2} \nabla U(\vec{r}) \cos\omega t.$$
 (12)

С другой стороны, при учете взаимодействия с полем в дипольном приближении (§2.1) действующий на электрон потенциал имеет вид

$$U(\vec{r},t) = U(\vec{r}) - e\vec{E}\vec{r}\cos\omega t.$$
(13)

Операторы возмущения в выражениях (12) и (13) оказываются различны и по зависимости от пространственных координат, и по зависимости от частоты поля. Однако матричные элементы обоих операторов возмущения, входящие в выражение для скорости перехода, при определенных условиях совпадают. Действительно,

$$\langle k | \vec{\alpha}(t) \nabla U(\vec{r}) | n \rangle = \vec{\alpha}(t) \langle k | [\nabla, \hat{H}_0] | n \rangle =$$
$$= \vec{\alpha}(t) (E_k - E_n) \langle k | \nabla | n \rangle = \vec{\alpha}(t) \hbar \omega_{kn} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \langle k | \hat{\vec{p}} | n \rangle.$$
(14)

Используя связь между матричными элементами импульса и координаты $\vec{p}_{kn} = im\omega_{kn}\vec{r}_{kn}$ (см. §6.2), получаем

$$V_{kn}^{(H)} = e\vec{E} \left(\frac{\omega_{kn}}{\omega}\right)^2 \vec{r}_{kn} = \left(\frac{\omega_{kn}}{\omega}\right)^2 \vec{d}_{kn} \vec{E} \,. \tag{15}$$

Таким образом, для резонансных ($\omega_{kn} = \omega$) переходов в слабом поле результаты приближения Крамерса – Хеннебергера и обычной теории возмущений совпадают.

§ 22.4 Метод Крамерса - Хеннебергера: стабилизация атома в сильном поле

• Для определения характера зависимости скорости ионизации от параметров поля рассмотрим одномерную модель с потенциалом $U(x) = -q\delta(x)$. У такой системы есть одно связанное состояние с энергией связи

$$E_0 = -\frac{mq^2}{2\hbar^2}.$$
 (16)

Усредненный потенциал $U_0(x)$ дается выражением

$$U_0(x) = -q \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \delta(x - a\cos\omega t) dt = -\frac{q}{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}}, \qquad (17)$$

где $a = e \mathcal{E}/m\omega^2$ есть амплитуда пространственных осцилляций свободного электрона в поле волны. Потенциал притяжения $U_0(x)$ имеет сингулярности в точках $x = \pm a$ и может быть приближенно заменен комбинацией двух корневых ям:

$$U_0(x) \approx -\frac{q}{\pi\sqrt{2a}} \cdot \frac{1}{\sqrt{x+a}} - \frac{q}{\pi\sqrt{2a}} \cdot \frac{1}{\sqrt{a-x}}.$$
 (18)

при $|x| \le a$ и $U_0(x) = 0$ вне этого интервала. Такая замена оправдана, если амплитуда *а* велика по сравнению с размером κ^{-1} области локализации ВФ в исходном потенциале,

$$\kappa a = \frac{mqa}{2\hbar^2} \gg 1. \tag{19}$$

Границей области сильного поля в КХ-смысле, в которой влияние поля волны становится сильнее влияния потенциала, можно считать точку $\kappa a = 1$.

• Отметим, что хотя в неподвижной δ -яме есть только одно связанное состояние, в усредненном потенциале $U_0(x)$ их может быть неограниченно много: величина

$$\delta \mathcal{N}(a) = \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-a}^{a} \sqrt{2m |U_0(x)|} dx$$
(20)

определяющая квазиклассическое число состояний дискретного спектра, растет с увеличением *a*, при $\kappa a >> 1$ $\mathcal{N}(a) \approx 0.5\sqrt{\kappa a}$.

Поскольку корневые ямы потенциала (18) взаимно далеки, в нулевом приближении их можно трактовать независимо. Рассмотрим дискретный спектр в одиночной корневой яме

$$U_r(x) = -\frac{\gamma}{\sqrt{x}}$$
 (x > 0), $U_r(x) = 0$ (x < 0). (21)

Из параметров уравнения Шредингера в такой модели можно единственным образом составить характерный масштаб энергии:

$$E_0 = \left(\frac{m\gamma^4}{\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{22}$$

Учитывая, что в нашей задаче $\gamma = q/2\pi\sqrt{a}$, приходим к выводу, что с ростом поля глубина уровней (потенциал ионизации) в усредненном потенциале уменьшается по закону $E_n \sim \mathcal{E}^{-2/3}$.

• Оператор возмущения V(x,t) зависит от времени периодически и может быть разложен в ряд Фурье:

$$V(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x) \cos n\omega t.$$
(23)

Оператор возмущения на частоте поля имеет вид

$$V_1(x) = -q \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \cos\omega t \,\delta(x - a\cos\omega t)dt = -\frac{q}{\pi} \cdot \frac{x}{a\sqrt{a^2 - x^2}}.$$
 (24)

Рассмотрим основное состояние системы в потенциале двух корневых ям. Если частота поля превосходит порог однофотонной ионизации, $\omega > \varepsilon_0/\hbar$, то возмущение $V_1(x)\cos\omega t$ приведет к ионизации системы. Скорость переходов будет определяться золотым правилом Ферми (см. §3.1). Матричный элемент перехода можно вычислить, используя для ВФ начального состояния приближение сильной связи,

$$\Psi_i(x) = \frac{\sqrt{\lambda}}{2} (\exp(-\lambda |x + a|) + \exp(-\lambda |x - a|)), \qquad (25)$$

где

$$\lambda = \left(\frac{m\gamma}{\hbar^2}\right)^{2/3} \approx 0.37 \left(\frac{m^2 q^2}{a\hbar^4}\right)^{1/3}$$
(26)

есть обратная длина спадания ВФ основного состояния, а ВФ конечного состояния считая плоской волной, $\psi_f(x) = \sin kx$, где

$$k = \frac{\sqrt{2m(\hbar\omega - \varepsilon_0)}}{\hbar}$$
(27)

Матричный элемент перехода дается интегралом

$$M_{if}(a) = -\frac{q\sqrt{\lambda}}{\pi a} \int_{0}^{a} \exp(-\lambda |x-a|) \frac{x}{\sqrt{a^2 - x^2}} \sin kx \, dx \,. \tag{28}$$

Функция $M_{if}(a)$ имеет вид затухающих осцилляций; огибающая осцилляций убывает пропорционально $a^{-1/2}$. Поскольку $a \sim \mathcal{E}$, это означает, что с ростом величины поля \mathcal{E} скорость однофотонной ионизации, пропорциональная квадрату матричного элемента, убывает (осциллируя) как $\dot{W} \sim \mathcal{E}^{-1}$. Это явление, противоположное обычной тенденции к росту скорости ионизации с увеличением интенсивности излучения (см. §§3.2, 10.1, 20.3), называется *стабилизацией атома сильным полем*.

Оно не является артефактом, свойственным модели или использованным приближениям, а является общим свойством моделей атомов в очень сильных полях. Физическая причина стабилизации в том, что при больших амплитудах колебаний электрона в поле волны почти все время он находится вдали от атомного остова и является почти свободным – а свободный электрон не поглощает энергию электромагнитного поля.

★ Впервые теоретический вывод о стабилизации атома сильным полем был сделан Пертом [Р75] на основе преобразования выражения (21.10). Экспериментальные данные, подтверждающие эффект стабилизации, редки. Чаще всего ссылаются на работы [HVN94] и [vDC+97]

[P75] G.J. Pert

The behaviour of atomic bound states in very strong electromagnetic fields J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1975, v. 8, no. 10, p. L173 - L178.

- [HVN94] J.H. Hoogenraad, R.B. Vrijen, and L.D. Noordam Ionization suppression of Rydberg atoms by short laser pulses Phys. Rev. A, 1994, v. 50, no. 5, p. 4133–4138
- [vDC+97] N.J. van Druten, R.C. Constantinescu, J.M. Schins, H. Nieuwenhuize, and H.G. Muller

Adiabatic stabilization: Observation of the surviving population Phys. Rev. A, 1997, v. 55, no. 1, p. 622–629



TEST #10

§ 23.1 Поглощение волны в разреженной плазме: классическая модель

◆ Рассмотрим теперь переходы между состояниями непрерывного спектра электрона в сильном переменном поле, связанные с рассеянием электрона на внешнем потенциале. Такие переходы могут использоваться, например, для описания взаимодействия с переменным полем разреженной сильно ионизованной плазмы. При рассеянии на кулоновском потенциале ионов электроны могут изменять свою энергию за счет переменного внешнего поля. Поэтому одной из основных задач теории является вычисление коэффициента поглощения разреженной *плазмы*.

• Рассмотрим вкратце результаты элементарной классической теории взаимодействия волны с плазмой (см. напр. [<u>BPC</u>90]). Движение электрона в плазме можно описать уравнением

$$m\vec{\vec{r}} + m\nu\vec{\vec{r}} = e\vec{E}(\vec{r},t) \tag{1}$$

Здесь v есть *частота соударений* - скорость релаксации импульса электрона в отсутствие внешнего поля. Из уравнения (1) при однородном электрическом поле, гармонически зависящем от времени, получается следующее выражение для диэлектрической проницаемости плазмы:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m(\omega^2 + \nu^2)} + i \frac{\nu}{\omega} \cdot \frac{4\pi n e^2}{m(\omega^2 + \nu^2)}$$
(2)

где *n* - концентрация электронов.

☆ Задача. Доказать, что вкладом от ионов в диэлектрическую проницаемость можно пренебречь.

Электромагнитная волна проходит в плазму, только если $\varepsilon'(\omega) > 0$. Это условие выполняется в области частот $\omega \ge \omega_p$, где *плазменная частота* ω_p определяется соотношением

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}.$$
 (3)

★ Плазменная частота равняется стандартной частоте $\omega_s = 1.77 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ при значении концентрации $n = 9.80 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Это значение много меньше, чем концентрация электронов проводимости в металлах ($n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$), и много больше, чем концентрация носителей в полупроводниках (типично $n \le 10^{18} \text{ см}^{-3}$).

[BPC90] - Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П. - Теория волн. 2-е изд. -М.: Наука, 1990. - гл. II, §6. • Во многих практически интересных случаях $\omega \gg \omega_p$ и отличие $\varepsilon'(\omega)$ от единицы несущественно. Значение $\varepsilon''(\omega)$ при этом также оказывается весьма малым, однако вид зависимости $\varepsilon''(\omega)$ от напряженности поля \mathcal{E} представляет самостоятельный интерес. В этом случае коэффициент по-глощения электромагнитной волны,

$$\alpha(\omega) = 2\frac{\omega}{c} \operatorname{Im}_{\sqrt{\varepsilon(\omega)}} \approx \frac{\omega}{c} \varepsilon''(\omega), \qquad (4)$$

дается формулой

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi n e^2 \nu}{mc(\omega^2 + \nu^2)}.$$
(5)

★ Поглощаемая мощность при небольшой частоте столкновений ей пропорциональна. Это объясняется тем, что свободные электроны (v = 0) не могут приобрести энергию у поля плоской волны. Величина $\alpha(\omega)$ определяет скорость, с которой в пространстве убывает плотность энергии волны. Энергия локально сохраняется: энергия электромагнитного поля переходит в кинетическую энергию вещества – которое само себе служит термостатом.

Входящая в уравнение (1) частота столкновений v в отсутствие поля есть скорость релаксации начального импульса электрона. Она учитывает процессы рассеяния с существенным изменением импульса:

$$\mathbf{v}(\mathbf{v}) = N\mathbf{v}\int \sigma(\mathbf{v},\theta)(1-\cos\theta)d\Omega, \qquad (6)$$

где *N* есть плотность ионов, *V* - скорость столкновения, $\sigma(V,\theta)$ – сечение упругого рассеяния на угол θ . Интеграл в (6) называется *транспортным сечением* σ_t . Для оценки v(V) можно принять, что вклад в σ_t дают только столкновения с такими значениями прицельного параметра ρ , при которых L(v) потенциальная энергия взаимодействия $Ze^2\rho^{-1}$ велика в сравнении с начальной кинетической энергией $mv^2/2$. Приняв в качестве границы таких значений такой параметр ρ_0 , что

$$\frac{Ze^2}{\rho_0} = \frac{mv^2}{2},\tag{7}$$

для транспортного сечения σ_t получаем оценку

$$\sigma_t(\mathbf{v}) \cong \pi \rho_0^2 = 4\pi \left(\frac{Ze^2}{m\mathbf{v}^2}\right)^2. \tag{8}$$

★ При расчете по формуле Резерфорда в транспортном сечении возникает логарифмическая расходимость интеграла на малых углах. Она исчезает при учете 1) экранировки взаимодействия в плазме или 2) квантовых поправок или 3) конечности концентрации ионов. В итоге в ответ (8) входит дополнительным множителем *куло-* новский логарифм L(v) – большая (~10) величина, слабо зависящая от скорости.

★ Для примера рассмотрим плазму с температурой $T = 3 \cdot 10^5$ K, что соответствует тепловой скорости электронов $v_T = 5.5 \cdot 10^8$ см с⁻¹. Тогда при $N = 10^{18}$ см⁻³ получаем значение $v = 5 \cdot 10^{10}$ с⁻¹ « ω_s .

• При численной оценке v мы исходили из предположения, что скорость V, входящую в выражение для транспортного сечения, можно считать равной средней тепловой скорости V_T . Это приближение оправдано, если скорость V_F , приобретаемая электроном под действием внешнего поля, мала в сравнении с V_T . В гармоническом поле $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E} \cos \omega t$ амплитуда колебаний скорости электрона есть

$$\mathbf{v}_F = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega}.\tag{9}$$

Она пропорциональна напряженности поля волны. Таким образом, в слабом поле, при условии $V_F \ll V_T$, частота столкновений v, а с ней и α , не зависят от \mathscr{E} . Поглощаемая единицей объема мощность P пропорциональна интенсивности излучения: $P \sim \alpha I \sim I$. В сильном поле, при условии $V_F \gg V_T$, частота столкновений v, а с ней и α , обратно пропорциональны кубу напряженности поля \mathscr{E} .

★ Рассматривая частоту столкновений как константу релаксации, мы можем рассматривать этот эффект как зависимость константы релаксации от внешнего поля. Эта возможность обсуждалась в § 17.3.

Поглощаемая единицей объема мощность *P* обратно пропорциональна квадратному корню из интенсивности излучения: $P \sim \alpha I \sim I^{-3/2} \cdot I$. Граница раздела этих областей, на которой выполняется условие $V_F = V_T$, определяет характерный *классический масштаб интенсивности*

$$I_c = \frac{c}{8\pi} \cdot \frac{m^2 V^2 \omega^2}{4e^2}.$$
 (10)

В стандартных условиях значение $I_c = 1.43 \cdot 10^{14} Bm cm^{-2}$.

§ 23.2 Поглощение волны в разреженной плазме: квантовая модель - предварительный анализ

• Обратимся теперь к анализу этой задачи с точки зрения квантовой теории. Параметром нестационарной теории возмущений является величина

$$\beta = \frac{e\mathcal{E}V}{\hbar\omega^2}.$$
(11)

Параметр теории возмущений есть отношение матричного элемента к (энергетической) расстройке, $\beta = V/\hbar\Delta$. Взяв оператор возмущения в *pA* - калибровке (см. §2.1), $\hat{V} = e\hat{p}A/mc$, получаем $V \sim e\mathcal{E}V/\omega$. Оценка $\hbar\Delta = \hbar\omega$ основана на том, что свободный электрон не может поглотить фотон: в однородном поле импульс сохраняется, и виртуальные переходы происходят в состояния, отстоящие по энергии на $\hbar\omega$ от энергетической поверхности.

★ В ближайшем будущем мы еще дважды получим обоснование формулы (11).

• Условие $\beta \ll 1$ определяет область параметров, в которой по квантовым меркам взаимодействие поля и волны является слабым. Ее граница определяется условием $\beta = 1$, которое определяет *квантовый масштаб интенсивности*

$$I_q = \frac{c}{8\pi} \cdot \frac{\hbar^2 \omega^4}{e^2 \mathbf{v}^2}.$$
 (12)

Отношение квантового и классического масштабов интенсивностей,

$$\frac{I_q}{I_c} = \left(\frac{\hbar\omega}{mv^2/2}\right)^2 = \xi^2, \qquad (13)$$

есть квадрат отношения энергии кванта к кинетической энергии электрона.

★ Для частот оптического диапазона и высокотемпературной плазмы эта величина мала. Для кванта стандартной частоты $\hbar\omega_s = 1.86 \cdot 10^{-12}$ эрг. Значению $\xi = 10^{-2}$ соответствует скорость электрона $v = 6.39 \cdot 10^8$ см с⁻¹ = c/47. Средняя тепловая скорость электрона имеет такую величину при температуре $T = 1.35 \cdot 10^6$ K = 116 эB, при которой плазма почти полностью ионизована. В этих условиях $I_q = 1.43 \cdot 10^{10}$ BT см⁻².

В области $I \ll I_q$ параметр квантовой теории возмущений β мал. При этом условии доминируют однофотонные процессы, скорость которых пропорциональна интенсивности внешнего поля. Однако классическая модель указывает, что линейная зависимость поглощаемой мощности от интенсивности сохраняется и в гораздо более широкой области, где параметр квантовой теории возмущений велик, и *а priori* существенны многофотонные процессы (ср. §9.2). Объяснить причину их неэффективности должна квантовая модель, не связанная с применением теории возмущений.

§ 23.3 Сечения переходов

• Постановка задачи: на основе квантовой теории, рассматривая взаимодействие электронов с ионами как возмущение, вычислить скорость изменения энергии системы электронов, находящихся в окружении неподвижных ионов, в присутствии сильного электромагнитного поля. ВФ невозмущенных электронов возьмем из §20.4:

'10

$$\Psi_{p}(\vec{r},t) = \mathscr{N} \exp i \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} \cdot \varphi(t), \qquad (14)$$

$$\varphi(t) = \exp\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} t - \frac{e\vec{p}\vec{E}}{m\omega^2} \cos\omega t + \frac{e^2\vec{E}^2}{4m\omega^2} \left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) \right].$$
(15)

Определим скорость изменения амплитуд квазиэнергетических состояний за счет рассеяния на кулоновском потенциале. Уравнение для амплитуд в первом порядке теории возмущений можно записать в виде

$$i\hbar \frac{\partial a(\vec{p}_2)}{\partial t} = \left\langle \Psi_{\vec{p}_1} \middle| U(\vec{r}) \middle| \Psi_{\vec{p}_2} \right\rangle = A(\vec{q}) M(t).$$
(16)

Пространственная часть матричного элемента перехода универсальна и не зависит от поля:

$$A(\vec{q}) = \int U(\vec{r}) \exp\left(-i\frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar}\right) d\vec{r}, \qquad (17)$$

где $\vec{q} = \vec{p}_2 - \vec{p}_1$ есть изменение импульса электрона при рассеянии. Величина $A(\vec{q})$ с точностью до константы есть амплитуда рассеяния в борновском приближении. Временная часть матричного элемента дается формулой

$$M(t) = \exp\frac{i}{\hbar} \left\{ \varepsilon t - \frac{e(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)\vec{E}}{m\omega^2} \sin\omega t \right\},$$
(18)

где $\varepsilon = (p_2^2 - p_1^2)/2m$ есть изменение кинетической энергии электрона при рассеянии. Правая часть уравнения (16) может быть разложена в ряд Фурье:

$$i\hbar \frac{\partial a(\vec{p}_2)}{\partial t} = A(\vec{q}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(i\left[\frac{\varepsilon}{\hbar} + n\omega\right]t\right).$$
(19)

При вычислении скорости перехода в различные состояния непрерывного спектра вклады дают только переходы, при которых кинетическая энергия электрона изменяется на величину, кратную кванту энергии внешнего поля: $\varepsilon = n\hbar\omega$.

• Дальнейшие расчеты повторяют обычную теорию возмущений для переходов в состояния непрерывного спектра (ср. §3.1) - но уже под воздействием "полигармонического" поля:

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\vec{p}_2 |A(\vec{q})|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^2 \delta(\varepsilon + n\hbar\omega).$$
⁽²⁰⁾

Переходя к сечениям переходов с изменением энергии электрона на $\pm n\hbar\omega$, получаем

$$\frac{d\sigma^{\pm n}}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\vec{q})}{d\Omega} \lambda J_n^2 \left(\frac{e\vec{E}\vec{q}}{m\hbar\omega^2}\right)$$
(21)

где $J_n(z)$ есть функция Бесселя первого рода,

$$\lambda = \frac{p_2}{p_1} = \sqrt{1 \pm n\xi}, \qquad \xi = \frac{2\hbar\omega}{mv^2}.$$
 (22)

Формула (21) для сечений переходов с поглощением (+n) или испусканием (-n) нескольких квантов внешнего поля при рассеянии на потенциале в поле гармонической волны называется формулой Бункина - Федорова [<u>БФ</u>65].

[<u>БФ</u>65] - Бункин Ф.В., Федоров М.В.
 Тормозной эффект в сильном поле излучения.
 ЖЭТФ, 1965, т.49, с. 1215 - 1221

• Формула (21) применима для произвольного вида рассеивающего потенциала $U(\vec{r})$. Все специальные зависимости определяются первым сомножителем – борновским сечением рассеяния. Параметр квантовой теории возмущений равен максимальному аргументу функций Бесселя:

$$\frac{e\mathcal{E}q}{m\hbar\omega^2} = \frac{e\mathcal{E}V}{\hbar\omega^2} = \beta.$$
(23)

(ср. (11)). В частности, замена функции Бесселя $J_1(z)$ первым членом степенного разложения приводит к результату первого порядка теории возмущений. Формула (21) осуществляет эффективное подсуммирование ряда ТВ, объединяя все процессы с одинаковым итоговым числом поглощенных (или испущенных) фотонов.

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #24 СИЛЬНОЕ ПОЛЕ – 5 КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ

§ 24.1 Скорость поглощения энергии при ВТЭ

★ Изменение энергии электрона при рассеянии на статическом потенциале в присутствии электромагнитной волны называется вынужденным тормозным эффектом (stimulated bremsstrahlung), или ВТЭ. Спонтанным тормозным эффектом считается уменьшение энергии электрона при рассеянии на статическом потенциале (в отсутствие электромагнитной волны) за счет тормозного излучения [ЛЛП, §68].

• Сечения переходов с изменением энергии электрона на $\pm n\hbar\omega$, полученные в §23.3, имеют вид

$$\frac{d\sigma^{\pm n}}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\vec{q})}{d\Omega} \lambda J_n^2 \left(\frac{e\vec{E}\vec{q}}{m\hbar\omega^2}\right),\tag{1}$$

где $J_n(z)$ есть функция Бесселя первого рода,

$$\lambda = \frac{p_2}{p_1} = \sqrt{1 \pm n\xi}, \qquad \xi = \frac{2\hbar\omega}{mv^2}.$$
 (2)

Пусть ψ - угол между направлением начального импульса электрона и вектором напряженности электрического поля: $\vec{p}_1 \vec{E} = p_1 \mathcal{E} \cos \psi$. Скорость изменения энергии электрона при ВТЭ определяется энергетическим сечением

$$\sigma_{\varepsilon}(\psi) = \int d\cos\theta d\phi \sum_{k=-\infty}^{\infty} k \frac{d\sigma^{k}}{d\Omega},$$
(3)

суммирующим сечения рассеяния на все углы с весом, равным числу поглощенных квантов. Мощность, поглощаемая единицей объема:

$$\mathsf{P} = \langle v N n \hbar \omega \sigma_{\varepsilon} \rangle, \tag{4}$$

где угловые скобки означают усреднение с функцией распределения электронов по скоростям. Для кулоновского потенциала сечение рассеяния,

$$\frac{d\sigma(\vec{q})}{d\Omega} = \frac{\left(2m^2 Z e^2\right)^2}{q^4},\tag{5}$$

быстро растет с уменьшением *q*. Переданный импульс *q* принимает минимальное значение для рассеяния вперед с поглощением одного кванта:

$$\min q = \sqrt{p^2 + 2m\hbar\omega} - p \approx \frac{m\hbar\omega}{p} = \frac{\hbar\omega}{v}.$$
 (6)

Таким образом, в области рассеяния вперед, где сечение рассеяния максимально, аргумент функций Бесселя,

$$\frac{e\mathcal{E}}{m\hbar\omega^2} \cdot \frac{\hbar\omega}{v} = \frac{e\mathcal{E}v}{\hbar\omega^2} \cdot \frac{\hbar\omega}{mv^2} = 2\beta\xi, \qquad (7)$$

оказывается мал при выполнении условия $\beta \xi \ll 1$, менее жесткого, чем малость параметра ТВ $\beta \ll 1$. Величина $\beta \xi$ не содержит \hbar и равна отношению амплитуды колебаний скорости электрона к его начальной скорости (ср. §23.1).

• Если $\beta \xi \ll 1$, то для оценки вкладов в энергетическое сечение от процессов с *n* квантами можно воспользоваться асимптотикой функций Бесселя при малых *z*:

$$J_n(z) \approx \frac{z^n}{2^n n!}.$$
(8)

Для рассеяния на кулоновском потенциале оценка вклада в энергетическое сечение от одноквантовых переходов дает

$$T_1 \sim \frac{1}{q^4} q^2 \Delta q \sim \frac{1}{\xi} \gg 1, \qquad (9)$$

а от двухквантовых –

$$T_2 \sim \frac{1}{q^4} q^4 \Delta q \sim \xi \ll 1.$$
⁽¹⁰⁾

Таким образом, если $1 \le \beta \ll \xi^{-1}$, то в поглощении энергии доминируют одноквантовые процессы, скорость которых пропорциональна интенсивности внешнего поля.

★ Итак, наличие области, где параметр квантовой ТВ велик, но продолжается зависимость $P \sim I$, специфично для кулоновского потенциала и определено господством рассеяния вперед. Для короткодействующих потенциалов можно ожидать существенных квантовых поправок к классическому выражению – но в этом случае и не ожидается соответствия между классическим и квантовым сечениями процессов.

★ Граница, на которой заканчивается доминирование рассеяния вперед, по внешне чисто случайным причинам не содержит \hbar , что составляет одну из теорем соответствия. Действительно, если $2\hbar\omega/mv^2 = \xi \ll 1$, то в основном происходят незначительные изменения энергии электрона, а это – случай мягких квантов, когда можно ожидать применимости классической теории.

$$J_n(z) \cong \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{11}$$

Зависимость сечений от напряженности поля будет в основном определяться первым множителем:

$$\frac{d\sigma^{\pm n}}{d\Omega} \sim J_n^2 \sim \frac{1}{z} \sim \mathcal{E}^{-1}.$$
(12)

Таким образом, энергетическое сечение будет обратно пропорционально величине поля – в согласии с классическим результатом. Итак, исследование асимптотик квантовой формулы (1) приводит к тем же законам зависимости поглощения от интенсивности, что и классическая теория.

★ Асимптотика $J_n(z)$, заданная формулой (11), применима, если $z \gg n$. В области $z \ll n$ функции Бесселя высших индексов весьма малы. Таким образом, при заданной величине β при ВТЭ эффективны процессы с числом квантов $n \leq \beta$. Такие ограничения на степень многофотонности уже встречались при рассмотрении рассеяния сильного поля на двухуровневой системе (§11.2).

★ Оценим мощность, поглощаемую единицей объема плазмы стелларатора $(T = 10^2 \ \Im B, n = 10^{14} \ cm^{-3})$. В соответствии с §23.1 поглощаемая мощность может быть оценена так:

$$\mathbf{P} \approx \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \frac{v}{c} I = \frac{n}{n_s} \cdot \frac{v}{c} I$$
(13)

где $n_s = 9.80 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ - концентрация электронов, соответствующая $\omega_p = \omega_s$. Частота столкновений

$$v \approx 4\pi N \frac{Z^2 e^4}{m^2 v^3} L(v) \approx 3.10^5 L(v) c^{-1} \approx 3.10^6 c^{-1}.$$
 (14)

Итак, $\mathbf{P} \sim 10^{-11} \text{ см}^{-1} I$. Пусть $I = I_c \approx 10^{14} \text{ Вт см}^{-2}$, что соответствует максимальной поглощаемой мощности. Тогда поглощаемая единицей объема мощность $\mathbf{P} \approx 10^3 \text{ Вт см}^{-3}$. При длительности импульса лазера $\Delta \tau \approx 10^{-12} \text{ с получаем прирост}$ энергии электронов за импульс поля $\Delta E \approx 10^{-9} \text{ Дж см}^{-3} \approx 10^{-4} \text{ Зв} / \text{электрон}$. Таким образом, подсветка горячей разреженной плазмы лазером – неэффективный способ ее нагрева, что естественно, так как рассматривается поглощение "прозрачной" плазмы (в экспериментах по ЛТС используются образцы с $n \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и излучение отражается от плазмы).

★ Теория ВТЭ используется для объяснения механизма оптического пробоя прозрачных диэлектриков. После многофотонных (а потому редких) переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости происходит нагрев электронов проводимости за счет ВТЭ при рассеянии на фононах.

КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ

§ 24.2 Взаимодействие с квантованным электромагнитным полем: перспективы подхода

• Целесообразность перехода к классу моделей, в которых электромагнитное поле описывается как квантовая система (тип 8 по классификации, данной в §1.2), определяется рядом недостатков ранее использованных предположений, а также соображениями полноты и последовательности.

В стандартной полуклассической схеме, рассматривавшей как действующее поле F_1 , так и рассеянное поле F_2 как классические, а систему *S* как квантовую, присутствовал постулат о сшивке двух теорий: средний дипольный момент квантовой системы $\langle \hat{d}(t) \rangle$ рассматривался как классический источник поля. Этот постулат не принадлежит ни классической, ни квантовой теориям и может стать источником трудностей.

Далее: для некоторых задач в полуклассических моделях мы получили результаты, не соответствующие ни классической теории, ни эксперименту – например, нам не удалось описать рассеяние света на свободном электроне (см. §20.4).

Далее: квантованное электромагнитное поле представляет собой почти всегда присутствующий термостат E – систему с бесконечным числом степеней свободы, связанную с атомной системой S и обеспечивающую отток из нее энергии. Спонтанное излучение мы описали феноменологически с помощью констант релаксации (§17.3). Однако в присутствии внешнего поля характер спонтанного излучения может измениться (см. начало §19.2), и нам нужны более последовательные методы его описания.

Далее, в полуклассическом формализме мы часто считали, что частота излучения ω равна частоте перехода квантовой системы ω_{nk} . Тем самым полю навязывались частоты движения системы. В общем случае это может быть и не так. Спектр излучения системы может быть и непрерывным – а до сих пор он всегда получался дискретным (система совершала квазипериодическое движение).

Last not least: исторически первой квантовой моделью была именно модель квантованного свободного электромагнитного поля (М. Planck, 1901), в то время как квантование механических систем было введено позже (A. Einstein, 1906 или N. Bohr, 1913).

§ 24.3 Квантование электромагнитного поля

◆ Напомним схему квантования свободного электромагнитного поля. Она состоит из трех этапов: разложения классического свободного электромагнитного поля по модам, введения гамильтонова формализма для классического поля [ЛЛП, §52] и квантования полученных гамильтоновых систем.

Из уравнений Максвелла для свободного поля,

$$\operatorname{rot}\vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{H}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div}\vec{E} = 0, \quad (15)$$
$$\operatorname{rot}\vec{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div}\vec{H} = 0$$

введением векторного потенциала \vec{A} , связанного с напряженностями электрического \vec{E} и магнитного \vec{H} полей соотношениями

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad \vec{H} = \operatorname{rot} \vec{A}$$
 (16)

и удовлетворяющего условию кулоновской калибровки $\operatorname{div} \vec{A} = 0$ для \vec{A} получается волновое уравнение

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{A}^2}{\partial t^2} = 0.$$
 (17)

◆ Удобно считать, что все поле излучения находится в кубе с ребром *L* и подчинено периодическим граничным условиям на стенках куба. Удовлетворяющее этим условиям частное решение волнового уравнения имеет вид

$$\vec{A}(\vec{r},t) = a_{\lambda}(t)\vec{A}_{\lambda}(\vec{r}), \qquad (18)$$

где пространственная часть решения $\vec{A}_{\lambda}(\vec{r})$ определяется формулой

$$\vec{A}_{\lambda}(\vec{r}) = N_{\lambda}\vec{e}_{\lambda} \exp i\,\vec{k}_{\lambda}\vec{r}\,.$$
(19)

Компоненты волнового вектора \vec{k}_{λ} в силу условий периодичности могут принимать только дискретное множество значений

$$k_{\lambda i} = \frac{2\pi}{L} n_{\lambda i} \tag{20}$$

Здесь индекс *i* нумерует декартовы компоненты. Вектор поляризации \vec{e}_{λ} в силу уравнения Максвелла div $\vec{E} = 0$ удовлетворяет условию поперечности $\vec{e}_{\lambda} \cdot \vec{k}_{\lambda} = 0$. При заданном \vec{k} достаточно рассматривать решения с двумя различными \vec{e}_{λ} : остальные решения могут быть получены как линейные комбинации. Поэтому можно считать \vec{e}_{λ} дискретной переменной, принимающей два значения. Совокупность четырех чисел $n_{\lambda 1}$,

• Общее решение уравнения (17) может быть представлено в виде

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\lambda} \left[a_{\lambda}(t) \vec{A}_{\lambda}(\vec{r}) + a_{\lambda}^{*}(t) \vec{A}_{\lambda}^{*}(\vec{r}) \right]$$
(21)

Используя известное из классической электродинамики выражение для плотности энергии поля

$$W = \frac{1}{8\pi} \left[\vec{E}^2 + \vec{H}^2 \right]$$
(22)

и соотношение (\vec{A}) , для энергии поля (в кубе с ребром L) имеем

$$E = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \qquad E_{\lambda} = \frac{N_{\lambda}^2 L^3 \omega_{\lambda}^2}{4\pi c^2} \Big[a_{\lambda} a_{\lambda}^* + a_{\lambda}^* a_{\lambda} \Big]$$
(23)

Введем переменные

$$Q_{\lambda} = \left(a_{\lambda} + a_{\lambda}^{*}\right) \sqrt{\frac{N_{\lambda}^{2}L^{3}}{4\pi c^{2}}}, \qquad P_{\lambda} = -i\omega_{\lambda} \left(a_{\lambda} - a_{\lambda}^{*}\right) \sqrt{\frac{N_{\lambda}^{2}L^{3}}{4\pi c^{2}}} \qquad (24)$$

В этих переменных энергия одной моды принимает вид

$$E_{\lambda} = \frac{1}{2} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2$$
(25)

Это выражение можно рассматривать как классическую функцию Гамильтона H_{λ} для одной моды в канонических переменных P_{λ}, Q_{λ} . Уравнения Гамильтона для одной моды совпадают с уравнениями Гамильтона для гармонического осциллятора единичной массы.

• Квантование поля сводится к замене классических переменных P_{λ} и Q_{λ} на квантовые операторы \hat{P}_{λ} и \hat{Q}_{λ} с перестановочными соотношениями $[\hat{P}_{\lambda}, \hat{Q}_{\lambda}] = -i\hbar$. Удобнее иметь дело с операторами рождения и уничтожения для осциллятора поля, которые определяются соотношениями

$$\hat{a}_{\lambda}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\hat{Q}_{\lambda} \sqrt{\omega_{\lambda}} - i\hat{P}_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \right), \qquad \hat{a}_{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\hat{Q}_{\lambda} \sqrt{\omega_{\lambda}} + i\hat{P}_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \right), (26)$$

и имеют перестановочные соотношения $[\hat{a}_{\lambda}, \hat{a}_{\lambda}^{+}] = 1$. Гамильтониан моды поля выражается через эти операторы так:

$$H_{\lambda} = \frac{\hbar \omega_{\lambda}}{2} \left(\hat{a}_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^{+} + \hat{a}_{\lambda}^{+} \hat{a}_{\lambda} \right).$$
(27)

Он совпадает с гамильтонианом гармонического осциллятора: поэтому моды электромагнитного поля называются осцилляторами поля. Из ра-

$$\vec{A}_{\lambda}(\vec{r}) = \frac{u}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \vec{e}_{\lambda} \exp i\vec{k}_{\lambda}\vec{r}, \qquad u = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}}.$$
 (28)

Величина *и* одинакова для всех мод. Оператор векторного потенциала принимает вид

$$\hat{\vec{A}}(\vec{r},t) = \sum_{\lambda} \left[\hat{a}_{\lambda} \vec{A}_{\lambda}(\vec{r}) + \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \vec{A}_{\lambda}^{*}(\vec{r}) \right].$$
(29)

Операторы напряженностей электрического $(\hat{\vec{E}})$ и магнитного $(\hat{\vec{H}})$ полей выражаются через $\hat{\vec{A}}(\vec{r},t)$ с помощью уравнений (16).

• Основное состояние электромагнитного поля, при котором все осцилляторы поля находятся в основных состояниях, называется *вакуумом поля*, или просто вакуумом. В квантовой модели вакуум даже в ограниченном объеме обладает бесконечно большой энергией. Учитывая, что модель "поля в замкнутом объеме" применима также к описанию электромагнитных полей в резонаторах, можно оценить величину эффектов, связанных с изменением энергии вакуума поля в резонаторе при изменении объема резонатора.

Задача. Оценить по порядку величины давление вакуума электромагнитного поля на стенки алюминиевого (плазменная частота $\omega_p = 2.4 \cdot 10^{16} c^{-1}$) кубического резонатора, возникающее за счет увеличения собственных частот при уменьшении объема резонатора.

Результаты таких расчетов находятся в вопиющем противоречии с наблюдениями.

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #25 КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ - 2

§ 25.1 Вакуум электромагнитного поля и сила Казимира

◆ Наивные расчеты энергии вакуума электромагнитного поля (см. задачу в конце §24.3) страдают методическим пороком: они учитывают изменение энергии вакуума в резонаторе, но не учитывают изменение энергии поля в объеме, занятом резонатором, в отсутствие резонатора. Более корректный расчет проведем для простейшей *toy model* – одномерной модели скалярного поля, ограниченного резонатором длины *а* (точками на прямой). Частоты мод резонатора даются формулой

$$\omega_n = c \frac{\pi}{a} n, \qquad (1)$$

что приводит к энергии вакуума в резонаторе

$$E_{VR} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \hbar c \frac{\pi}{a} n = \frac{\hbar \omega_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} n .$$
 (2)

В вакууме без резонатора частотный спектр мод поля непрерывный, со спектральной плотностью состояний

$$\rho(\omega) = \frac{a}{\pi c} \tag{3}$$

что приводит к значению энергии в мысленно выделенном объеме резонатора

$$E_{VF} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \int_0^\infty n \, dn \tag{4}$$

Таким образом, изменение энергии вакуума, связанное с присутствием резонатора, дается выражением

$$E_{C} = E_{VR} - E_{VF} = \frac{\hbar\omega_{0}}{2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} n - \int_{0}^{\infty} n \, dn \right], \tag{5}$$

которое представляет разность двух бесконечных величин. Для вычисления этой разности воспользуемся трюком: введем экспоненциальное уменьшение энергии с ростом n, а затем устремим его к нулю. Произведем в сумме и под интегралом замену $n \rightarrow ne^{-\alpha n}$. Тогда

$$\sum_{n=1}^{\infty} n \to \sum_{n=1}^{\infty} n e^{-\alpha n} = \frac{e^{\alpha}}{\left(e^{\alpha} - 1\right)^2},\tag{6}$$

$$\int_{0}^{\infty} n \, dn \to \int_{0}^{\infty} n e^{-\alpha n} \, dn = \frac{1}{\alpha^2}.$$
(7)

Разность этих величин при малых α есть $\Delta = -\frac{1}{12} + O(\alpha)$, откуда

$$E_{C} = -\frac{\hbar\omega_{0}}{24} = -\frac{\pi}{24} \cdot \frac{\hbar c}{a}$$
(8)

Таким образом, в нашей модели наличие граничных условий на поле ведет к появлению силы, стремящейся сблизить "стенки" резонатора - чем меньше *a*, тем меньше энергия системы.

• Рассмотрим более реалистическую модель. Пусть электромагнитное поле заключено в кубическом резонаторе с объемом L^3 , ограниченном идеально проводящими поверхностями. Пусть идеально проводящая квадратная пластина со стороной L расположена внутри этого резонатора параллельно плоскости xy. Сравним ситуации, в которых эта пластина находится на малом (в сравнении с L) расстоянии a от границы – и на большом (скажем, равном L/2) расстоянии.

Моды электромагнитного поля в области $0 \le x, y, z \le L$ имеют значения компонент волнового вектора

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{\pi}{L} n_z, \tag{9}$$

где n_x, n_y, n_z - неотрицательные целые числа. Обозначим

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{\kappa^2 + k_z^2} \,. \tag{10}$$

Каждому набору k_x, k_y, k_z соответствуют две моды, кроме случая, когда одно из чисел n_i имеет нулевое значение – тогда имеется одна мода. Для поперечных компонент k_x, k_y это несущественно, так как при большом L их можно считать непрерывными переменными. Тогда нулевая энергия дается выражением

$$\frac{1}{2}\Sigma\hbar\omega = \hbar c \frac{L^2}{\pi^2} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n^2 \frac{\pi^2}{a^2} + k_x^2 + k_y^2} \right] dk_x dk_y \quad (11)$$

Вводя полярные координаты в плоскости ху, имеем

$$\frac{1}{2}\Sigma\hbar\omega = \hbar c \frac{L^2}{\pi^2} \cdot \frac{\pi}{2} \sum_{(0)1}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{n^2 \frac{\pi^2}{a^2} + \kappa^2} \kappa d\kappa$$
(12)

где знак (0)1 обозначает, что слагаемое с n = 0 должно быть умножено на ¹/₂. Для очень больших значений *а* суммирование в (12) может быть

заменено интегрированием, и для разности энергий в двух конфигурациях получаем

'10

$$E_{C} = \hbar c \frac{L^{2}}{\pi^{2}} \cdot \frac{\pi}{2} \left\{ \sum_{(0)1}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \sqrt{n^{2} \frac{\pi^{2}}{a^{2}} + \kappa^{2}} \kappa d\kappa - \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \sqrt{k_{z}^{2} + \kappa^{2}} \kappa d\kappa \left(\frac{a}{\pi} dk_{z}\right) \right\}. (13)$$

Для получения сходящихся выражений надо умножить подынтегральные функции на обрезающую функцию $f(k/k_m)$, равную единице при $k \ll k_m$ и быстро спадающую при больших значениях аргумента. Вводя переменную $u = a^2 \kappa^2 / \pi^2$, получаем

$$E_{C} = \hbar c L^{2} \cdot \frac{\pi^{2}}{4a^{3}} \left\{ \sum_{\substack{(0)1 \ 0}}^{\infty} \sqrt{n^{2} + u} f\left(\pi \sqrt{n^{2} + u} / ak_{m}\right) du - \right\}.$$
 (14)
$$- \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \sqrt{n^{2} + u} f\left(\pi \sqrt{n^{2} + u} / ak_{m}\right) du dn \right\}.$$

Для вычисления разности в фигурных скобках применим формулу Эйлера – Маклорена

$$\sum_{(0)1}^{\infty} F(n) - \int_{0}^{\infty} F(n) dn = -\frac{1}{12} F'(0) + \frac{1}{720} F'''(0) + \dots$$
(15)

Вводя обозначение $w = u + n^2$, имеем

$$F(n) = \int_{n^2}^{\infty} w^{1/2} f(w\pi/ak_m) dw$$
(16)

откуда

$$F'(n) = -2n^2 f\left(n^2 \pi/ak_m\right) \tag{17}$$

Нужные для вычисления (15) значения равны F'(0) = 0 и F''(0) = -4. Высшие производные будут содержать положительные степени множителя π/ak_m и потому могут быть отброшены в пределе $ak_m \gg 1$. В итоге получаем

$$\frac{E_C}{L^2} = -\frac{\pi^2}{720} \frac{\hbar c}{a^3}.$$
 (18)

Таким образом, изменение энергии вакуума электромагнитного поля между двумя параллельными проводящими пластинами приводит к возникновению между ними силы притяжения. Ее называют *силой Казимира* по имени автора, впервые вычислившего ее значение [С48]. Величина силы на единицу площади

$$F = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{a^4} = 0.013 \left(\frac{1\,\text{MKM}}{a}\right)^4 \,\partial u \mu \,\, c m^{-2} \tag{19}$$

Впервые сила Казимира была измерена в работе [S58]. Полученные данные имели невысокую точность, но позволили сделать вывод: «результаты не противоречат теоретическим предсказаниям Казимира». Лишь спустя много лет погрешность измерений была доведена до 5% [L97].

- [C48] H. Casimir On the attraction between two perfectly conducting plates Proc. K. Ned. Acad. Wet., 1948, v. 51, p. 793 - 795.
- [S58] M. J. Sparnaay
 Measurements of attractive force between flat plates
 Physica, 1958, v. 24, no. 6-10, p. 751-764
- [L97] S. K. Lamoreaux Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6μm Range Phys. Rev. Lett., 1997, v. 78, no. 1, p. 5–8

§ 25.2 Фотоны

• Возбужденные состояния квантованного электромагнитного поля (световые кванты) называются *фотонами*.

Die ganzen Jahre bewußter Grübelei haben mich der Antwort der Frage "Was sind Lichtquanten" nicht näher gebracht. Heute glaubt zwar jeder Lump, er wisse es, aber er täuscht sich.

A. Einstein¹

Термин «фотон» в составе прилагательного «*N* - фотонный» мы употребляли выше при использовании классических моделей электромагнитного поля. В теории возмущений *N* - фотонным назывался переход между состояниями атомной системы под воздействием гармонического поля $\hat{V} \cos \omega t$, описываемый членами *N* -го порядка по полю в выражениях для амплитуд. Например, в первом порядке при начальном условии $a_k(0) = \delta_{kn}$ амплитуда состояния $|k\rangle$ дается выражением

$$a_{k}(t) = -\frac{V_{kn}}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} - 1}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} - 1}{\omega_{kn}-\omega} \right].$$
(2.33)=(20)

¹ Из письма к М. Бессо от 12.12.1951. Перевод: "Целые годы направленных размышлений не приблизили меня к ответу на вопрос «Что суть световые кванты?» Сегодня буквально каждый негодяй верит, что знает его, но он ошибается".

Если $\omega_{kn} > 0$ (переход идет в состояние с большей энергией), то основной вклад в амплитуду перехода дает второе слагаемое в (20), которое порождается компонентой отрицательной частоты в функции $\cos \omega t$. Вычитание частоты в показателе экспоненты можно интерпретировать как поглощение *кванта* энергии поля $\hbar \omega$ системой (переход становится резонансным, если $E_k = E_n + \hbar \omega$). Аналогично во втором порядке в доминирующем члене присутствует экспонента $e^{i(\omega_{kn}-2\omega)t}$ (ср. (9.3)), которую можно интерпретировать как описывающую переход, сопровождаемый поглощением двух квантов $\hbar \omega$. Однако при классическим описании поля и другие процессы (в частности те, при которых увеличение энергии системы сопровождается излучением фотона), имеют ненулевую вероятность. Дело в том, что для системы с зависящим от времени гамильтонианом (неавтономной системы) закон сохранения энергии не имеет места.

★ Возможно, более строгая терминология, заменяющая при классическом описании поля «фотон» на «квант», была бы лучше. Но для ее введения придется перевернуть сложившуюся практику, что нелегко: в настоящее время термин «многофотонный» используется в шесть раз чаще термина «многоквантовый» (Google, ноябрь 2010).

В квантовой радиофизике собственно термином «фотон» могут обозначаться разные модели.

• Модель 0. Фотон - 0 есть частица с нулевой массой покоя, движущаяся со скоростью света c, состояние которой (в выбранной системе отсчета) характеризуется импульсом \vec{p} и состоянием поляризации (например, линейной – заданной вектором \vec{e} , ортогональным импульсу, $\vec{e} \cdot \vec{p} = 0$). Энергия фотона E = cp.

Такая модель вместе с термином «фотон» была введена Дж. Льюисом в 1926 году² [L26]. Ее достаточно для решения задач с помощью законов сохранения импульса и энергии (например, рассеяния фотона на атомной системе при заданной геометрии или отражения фотона от зеркала). Указание состояния поляризации фотона – 0 во многом формально: изменение поляризации при взаимодействии этой моделью не описывается.

[L26] G.N. LewisThe Conservation of PhotonsNature, 1926, v. 118, Part 2, p. 874-875

² Исторически введение фотона предшествовало последовательному квантованию электромагнитного поля (P.A.M. Dirac, 1927).

• Модель 1. Фотон - 1 есть состояние квантованного электромагнитного поля, заключенного в условные границы («куб периодичности» с ребром *L*, на границах которого моды векторного потенциала должны удовлетворять условиям периодичности, служащий также и телом отсчета), в котором все осцилляторы поля, кроме одного, находятся в основных (вакуумных) состояниях, а один из осцилляторов поля λ находится в состоянии с $n_{\lambda} = 1$. Такое состояние можно называть «фотоном в моде λ » и обозначать $|\lambda\rangle$.

Состояние фотона - 1 характеризуется волновым вектором k (компоненты которого должны быть взяты из набора чисел $2\pi N/L$ с целочисленными N), пропорциональным импульсу фотона $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, и состоянием поляризации (см. выше). Энергия фотона - 1 точно определена и равна $E = cp = \hbar \omega$.

Такая модель удобна в качестве начального состояния в задачах о рассеянии света на атомных системах (электронах, атомах, молекулах).

• Модель 2. Фотон - 2 есть волновой пакет, составленный из фотонов первой модели:

$$|\Lambda\rangle = \sum_{\lambda} A(\lambda) |\lambda\rangle \tag{21}$$

и нормированный условием

$$\sum_{\lambda} \left| A(\lambda) \right|^2 = 1.$$
 (22)

Если в разложении (21) отличны от нуля более двух амплитуд, то пакет не имеет точно определенного импульса и (может быть) точно определенной энергии. В зависимости от соотношения между средними значениями динамических характеристик пакета и их стандартными отклонениями можно выделить случаи:

2А. Узкий пакет – в котором $\Delta p \ll \overline{p}$, $\Delta E \ll \overline{E}$. Такой пакет может служить аналогом фотона - 1, поскольку имеет хорошо определенные импульс и энергию, будучи при этом локализован в пространстве. Эту модель удобно применять при описании распространения электромагнитного поля в экспериментальной установке, особенно на вербальном уровне (например, «фотон проходит через собирающую линзу и падает на светоделительный куб»).

2В. Широкий пакет – в котором $\Delta p \ge \overline{p}$, но $\Delta E \ll \overline{E}$. Эта модель может описывать конечные состояния в задачах об излучении поля квантовыми системами. Например, при спонтанном излучении фотона покоившимся атомом формируется квазиизотропный ($\overline{p} = 0$) пакет, ос-
новная часть вероятности в котором сосредоточена в сферическом слое толщиной $R \sim c\Gamma^{-1}$, где Γ - скорость перехода из начального в конечное состояние. В видимом диапазоне для дипольных переходов типично $R \sim 30 \, M$.

С формальной стороны можно выделить и третий класс **2**С – класс «сверхшироких пакетов», для которых и $\Delta p \ge \overline{p}$, и $\Delta E \ge \overline{E}$. Задачи, для описания которых нужны такие пакеты, в настоящее время не видны.

◆ Напомним, что в соответствии с общими правилами интерпретации математического аппарата квантовой теории в моделях 1 и 2 речь идет о пространственной локализации амплитуды вероятности, а не самого фотона (в равной мере это относится и к частицам конечной массы – например, электронам). В актах рассеяния и регистрации фотон выступает как неделимая частица со свойствами фотона – 0. Так, проходя через светоделительный куб, фотон получает два канала распространения – и может быть зарегистрирован детектором либо в первом, либо во втором канале.

☆ Часто бывает так, что процесс, невозможный в данной модели, становится возможным при ее уточнении (пример – генерация второй гармоники центросимметричной системой, §8.2). Эвристика "Pinafore": «What, never? // No, never! // What, never? // Hardly ever!» Задача. Оценить вероятность того, что при прохождении через светоделительный куб фотон разделится на два фотона.

Обсуждение моделей фотонов в более широком контексте содержится в обзоре [<u>К</u>94].

🚇 [<u>К</u>94] Д.Н. Клышко

Квантовая оптика: квантовые, классические и метафизические аспекты. УФН, 1994, т. 164, №11, с. 1187 – 1213

Смысл термина «фотон» обычно ясен из контекста, поэтому в дальнейшем мы не будем указывать индексы моделей.

§ 25.3 Оператор взаимодействия

• В §2.1 был построен одночастичный гамильтониан системы, взаимодействующей со внешним электромагнитным полем, заданным векторным потенциалом $\vec{A}(\vec{r},t)$. Этот гамильтониан имеет структуру $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$, где \hat{H}_0 есть гамильтониан невозмущенной системы,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + e\Phi_0(\vec{r}),$$
(23)

а оператор возмущения $\hat{V}(t)$ имеет вид

$$\hat{V}(t) = -\frac{e}{mc}\hat{\vec{p}}\vec{A}(\vec{r},t) + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2(\vec{r},t).$$
(24)

Описывая электромагнитное поле квантовой моделью, мы должны заменить в этом выражении векторный потенциал \vec{A} на построенный в §24.3 оператор $\hat{\vec{A}}$ и добавить к \hat{H} гамильтониан свободного электромагнитного поля

$$\hat{H}_F = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left(\hat{a}_{\lambda}^{+} \hat{a}_{\lambda} + \frac{1}{2} \right).$$
(25)

Оператор взаимодействия $\hat{V}(t)$ для квантовой модели поля представляется в виде суммы двух слагаемых $\hat{V}(t) = \hat{V}_1(t) + \hat{V}_2(t)$, где \hat{V}_1 - линеен, а \hat{V}_2 квадратичен по операторам рождения и уничтожения фотонов:

$$\hat{V}_{1}(t) = -\frac{eu}{mc} \hat{\vec{p}} \sum_{\lambda} \frac{\vec{e}_{\lambda}}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \left[\hat{a}_{\lambda} e^{i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)} + \hat{a}_{\lambda}^{+} e^{-i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)} \right]$$
(26)

$$\hat{V}_{2}(t) = \frac{e^{2}u^{2}}{2mc^{2}} \left\{ \sum_{\lambda} \frac{\vec{e}_{\lambda}}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \left[\hat{a}_{\lambda} e^{i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)} + \hat{a}_{\lambda}^{+} e^{-i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)} \right] \right\}^{2}$$
(27)

Входящий в эти выражения одинаковый для всех мод поля множитель *и* есть

$$u = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}} \tag{28}$$

★ Построенный гамильтониан описывает изолированную систему "электрон в статическом потенциале + поперечное электромагнитное поле + их взаимодействие". Такая система автономна. Почему в гамильтониане присутствуют зависящие от времени члены?

• Оператор \hat{V} описывает взаимодействие двух частиц - электрона и фотона. В нем присутствуют операторы $\hat{\vec{p}}$ и $\exp(i\vec{k}\vec{r})$, действующие на ВФ электрона. Где операторы, действующие на ВФ фотона?

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #26 КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ -3

TEST #11

§ 26.1 Число фотонов в моде

• Свободное электромагнитное поле в кубе периодичности неограниченно большого размера, $L \to \infty$, обладает непрерывным энергетическим спектром. Поэтому все переходы, вызванные взаимодействием с таким полем, могут быть описаны выражением для скорости переходов в состояния непрерывного спектра - золотым правилом Ферми (§3.2),

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \tilde{V}_{nk}^{(m)} \right|^2 \rho(E_k).$$
(1)

Здесь $\tilde{V}_{nk}^{(m)}$ составной (в общем случае) матричный элемент *m*-го порядка теории возмущений (см. §9.1), а $\rho(E_k)$ есть плотность конечных состояний. Последняя зависит от числа и типа частиц в конечных состояниях непрерывного спектра. Для подсчета (сглаженной энергетической) плотности конечных состояний обычно применяется квазиклассическая оценка:

$$\rho(E) = \frac{d\overline{\delta V}(E)}{dE},\tag{2}$$

где $\overline{\mathcal{N}}(E)$ - сглаженное число состояний с энергией, меньшей *E* - дается формулой Вейля (см. §7.2),

$$\overline{\mathcal{N}}(E) = \frac{\Omega(E)}{\left(2\pi\hbar\right)^d},\tag{7.14} \equiv (3)$$

в которой $\Omega(E)$ есть величина фазового объема, занятого классическими состояниями с энергией, не превосходящей E, а d есть число степеней свободы.

• В ряде задач в конечном состоянии атомная система находится в состоянии дискретного спектра, а поле содержит фотон в одной из мод. Поскольку в таких задачах часто представляет интерес угловое распределение состояний фотона, следует выделить плотность состояний для элемента телесного угла $d\Omega$, внутри которого лежит волновой вектор фотона. Для частиц с законом дисперсии $E = cp = c\hbar k$ из (3) получаем

$$\rho_1(E)d\Omega = L^3 \frac{\omega^2}{\hbar (2\pi c)^3} d\Omega$$
(4)

• Рассмотрим первый порядок теории возмущений, когда $\widetilde{V}_{nk}^{(m)}$ есть V_{nk} - матричный элемент оператора взаимодействия. Матричные элементы оператора $\hat{V_1}$ отличны от нуля только между состояниями поля, в которых число фотонов в моде λ отличается на единицу. Для $\hat{V_2}$ отличны от нуля матричные элементы между состояниями поля, в которых или числа фотоны в двух модах λ_1 и λ_2 отличаются на единицу, или в одной моде отличаются на две единицы, или одинаковы. Таким образом, операторы $\hat{V_1}$ и $\hat{V_2}$ описывают различные типы переходов и могут рассматриваться по отдельности.

Рассмотрим оператор \hat{V}_1 . Скорости процессов, сопровождающихся поглощением (\dot{W}_{λ}) и испусканием (\dot{W}_{λ}^+) фотонов моды λ пропорциональны квадратам матричных элементов операторов \hat{a}_{λ} и \hat{a}_{λ}^+ . Поэтому

$$\dot{W}_{\lambda} = \dot{W}_0 n_{\lambda}, \qquad \dot{W}_{\lambda}^+ = \dot{W}_0 (n_{\lambda} + 1). \tag{5}$$

Таким образом, переходы с испусканием фотона более вероятны, чем с его поглощением.

В точке пространства, где присутствует излучение с интенсивностью (плотностью потока энергии) I, плотность энергии электромагнитного поля есть W = I/c (какое предположение использовано при установлении этого выражения?). Разделив это выражение на число мод поля в единице объема, отвечающих спектральному интервалу $d\omega$ и интервалу телесных углов распространения $d\Omega$ (см. (4)),

$$N = \rho_1(E) d\hbar\omega = \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega d\Omega$$
 (6)

и на энергию кванта $\hbar\omega$, получаем выражение для *числа фотонов в моде*

$$n_{\lambda} = \frac{W}{N\hbar\omega} = \frac{(2\pi c)^{3}}{\hbar\omega^{3}c} \cdot \frac{I}{d\omega d\Omega}.$$
 (7)

Таким образом, входящее в выражения (5) число фотонов в моде n_{λ} связано со *спектральной яркостью* излучения $B(\omega, \Omega)$ - плотностью потока энергии в единицу спектрального интервала и в единицу телесного угла - соотношением

$$n(\vec{k}) = \frac{\lambda^3}{\hbar c} B(\omega, \Omega), \qquad (8)$$

где λ есть длина волны фотона данной моды. По соображениям размерности формулу (8) можно переписать в виде

$$n(\vec{k}) = \frac{B(\omega, \Omega)}{B_V(\omega, \Omega)}, \qquad (9)$$

где величина $B_{\nu}(\omega, \Omega)$ – спектральная яркость вакуума – есть

$$B_{V}(\omega,\Omega) = \frac{1}{8\pi^{3}} \frac{\hbar\omega^{3}}{c^{2}}$$
(10)

На стандартной частоте $B_V(\omega, \Omega) = 2.62 \cdot 10^{-5}$ эрг см⁻².

★ Пример 1. Оценим максимальное число фотонов в моде для стандартного лазера. Ширина спектральной полосы излучения $\Delta \omega$ определяется конечной длительностью импульса лазера: $\Delta \omega \sim \tau^{-1} \sim 10^8 \text{ c}^{-1}$. Считая, что пучок имеет радиус a = 0.1 см и обладает дифракционной расходимостью $\theta \approx \lambda/a \approx 10^{-3}$, имеем для телесного угла оценку $\Delta \Omega \sim 3.1 \cdot 10^{-6}$. Спектральная яркость есть $B \sim 3.2 \cdot 10^{12}$, а коэффициент $\lambda^3/\hbar c$ для стандартного лазера равен $3.8 \cdot 10^4$. В итоге max $n_{\lambda} \approx 1.4 \cdot 10^{18}$.

★ Пример 2. Оценим число видимых (зеленых, $\omega = 2\omega_s = 3.5 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$) фотонов в моде солнечного света. Интенсивность солнечного света $I_s = 0.14 \ Bm \ cm^{-2}$. Ширину спектра оценим величиной $\Delta \omega = 2.0 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ (в полосе такой ширины содержится половина спектральной интенсивности излучения Солнца). Телесный угол, под которым видно Солнце, $\Delta \Omega \sim 6.8 \cdot 10^{-5}$. Спектральная яркость есть $B \sim 1.0 \cdot 10^{-5}$, а коэффициент $\lambda^3/\hbar c$ равен $4.7 \cdot 10^3$. Учитывая наличие двух состояний поляризации, получаем в итоге так $n_{\lambda} \approx 0.024$. Эта оценка несколько больше вытекающего из формулы Планка значения $n_{\lambda} = 0.0093$.

☆ Задача. Выше на основе астрономических данных было оценено число фотонов в моде солнечного света у поверхности Земли ($n_{\lambda} \approx 0.024$). Расстояние от Солнца до Сатурна примерно в 10 раз больше, чем до Земли. Чему равно число фотонов в моде солнечного света у поверхности Сатурна?

• Формула (8) применима, когда частотный и угловой спектры поля могут считаться непрерывными – например, для свободного поля. Для поля в резонаторе возможны состояния, в которых вся энергия поля сосредоточена в одной моде. В этом случае число фотонов в этой моде равно

$$n = \frac{WV}{\hbar\omega} \tag{11}$$

где *V* - объем резонатора.

☆ Задача. Оценить характерную напряженность электрического поля в состоянии, содержащем один оптический фотон в моде резонатора Фабри – Перо.

• Рассмотрим лазер, работающий в непрерывном одномодовом режиме. Поле излучения внутри резонатора может быть характеризовано числом фотонов в моде (резонатора) n_i . С другой стороны (выходного зеркала) поле излучения может быть характеризовано числом фотонов в моде (свободного поля) n_e . Найдем связь между n_i и n_e . Если γ – скорость потерь резонатора, то интенсивность излучения непосредственно вне резонатора есть

$$I = n_i \frac{\hbar\omega}{\pi a^2} \gamma \,, \tag{12}$$

где а - радиус пучка. Плотность фотонов в моде излучения равна

$$n_e = \frac{\lambda^3}{\hbar c} B(\omega, \Omega) = \frac{\lambda^3}{\hbar c} \cdot \frac{I}{\Delta \omega \Delta \Omega}$$
(13)

Пусть ширина пространственного спектра излучения определяется дифракцией:

$$\Delta \Omega = \pi \theta^2 = \pi \left(\frac{\lambda}{a}\right)^2; \tag{14}$$

здесь $\theta = \lambda/a$ - дифракционный угол. Ширина частотного спектра $\Delta \omega$ определяется *формулой Таунса* [<u>К</u>86, с.216]:

$$\Delta \omega = \frac{\hbar \omega^3}{PQ^2} \cdot \frac{N_2}{N_2 - N_1} \tag{15}$$

где P - мощность излучения ($P = n_i \hbar \omega \gamma$), Q - добротность резонатора ($Q = \omega / \gamma$), а N_2 и N_1 - населенности нижнего и верхнего уровней рабочего перехода лазера.

[<u>К</u>86] – Клышко Д.Н. – Физические основы квантовой электроники. - М.: Наука, 1986. - 296 с.

В итоге получается соотношение

$$n_e = \frac{2}{\pi} n_i^2 \left(1 - N_1 / N_2 \right). \tag{16}$$

которое не содержит ни параметров ω , γ и a, ни фундаментальных констант \hbar и c.

★ Большое характерное число фотонов в заселенных модах n_{λ} не может служить достаточным основанием для возможности пренебречь процессами спонтанного излучения в сравнении с вынужденными (ср. (5)), так как для вычисления скорости вынужденных переходов нужно провести интегрирование по телесному углу заселенных мод, который может быть мал.

EOL 💿

ЛЕКЦИЯ #27 КВАНТОВАННОЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ - 4

§ 27.1 Скорости спонтанных переходов при дипольном (E1) излучении

• Если в начальный момент поле находится в вакуумном состоянии, а система S находится в возбужденном состоянии, то единственным возможным процессом будет испускание фотона (или фотонов). Рассмотрим скорость испускания одного фотона: она определяется выражением

$$\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle k, \mathbf{1}_{\lambda} \left| \hat{V}_{1} \right| n, \mathbf{0}_{\lambda} \right\rangle \right|^{2} \rho_{1}(E_{k}), \qquad (1)$$

где индексы *n* и *k* относятся к начальному и конечному состояниям, а энергия конечного фотона $E_k = \hbar \omega_{nk}$. Воспользуемся мультипольным разложением (см. §2.2). Обозначим через \hat{V}^+ часть оператора \hat{V}_1 , содержащую только операторы рождения. В дипольном приближении $\hat{V}^+ = -\hat{d}\hat{E}^+$, где \hat{E}^+ есть часть оператора электрического поля, содержащего только \hat{a}^+ :

$$\hat{V}^{+} = -i\frac{u}{c}\hat{\vec{d}}\sum_{\lambda}\vec{e}_{\lambda}\sqrt{\omega_{\lambda}}\hat{a}_{\lambda}^{+}e^{i\omega_{\lambda}t}.$$
(2)

В силу закона сохранения энергии в (1) входит матричный элемент, соответствующий переходу с испусканием фотона с энергией $\hbar\omega_{nk}$. Поэтому

$$V_{nk} = i \frac{u}{c} \vec{d}_{nk} \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\omega_{nk}} .$$
(3)

Используя выражение для плотности однофотонных состояний

$$\rho_1(E_k) = L^3 \frac{\omega_{nk}^2}{\hbar (2\pi c)^3} d\Omega$$
(4)

из (1) получаем выражение для скорости перехода

$$\dot{W}_{E1} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \vec{d}_{nk} \vec{e}_{\lambda} \right|^2 d\Omega \,. \tag{5}$$

Выбирая ось сферической системы координат в направлении импульса фотона \vec{k} и учитывая, что вектор поляризации \vec{e}_{λ} ортогонален \vec{k} , имеем

$$\dot{W}_{E1} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \vec{d}_{nk} \right|^2 \sin^2\theta d\cos\theta d\phi.$$
 (6)

Интегрируя по телесному углу и суммируя по поляризациям, получаем для полной скорости спонтанного излучения выражение

$$\dot{W}_{E1} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \left| \vec{d}_{nk} \right|^2.$$
(7)

Для атомов в нижних состояниях типичный матричный элемент дипольного момента $d_{nk} \sim ea_0$. Поэтому формулу (7) удобно переписать в приведенном виде:

$$\dot{W}_{E1} \sim \alpha^3 \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^3 \left(\frac{d_{nk}}{ea_0}\right)^2 \omega_a.$$
 (8)

В стандартном случае $\dot{W}_{E1} \approx 1.26 \cdot 10^6 c^{-1}$.

☆ Задача. Оценить скорости спонтанных радиационных переходов между колебательными и вращательными состояниями двухатомной молекулы.

• Рассмотрим спонтанное излучение высоковозбужденных (ридберговских) состояний атомов. Если $l \approx n$ ("круговые орбиты"), то из-за дипольного правила отбора $l \rightarrow l \pm 1$ разрешены переходы $n \rightarrow n-1$. Для них

$$d \sim ea_0 n^2, \quad \omega \sim \omega_a n^{-3} \tag{9}$$

и $\dot{W}_{E1} \sim n^{-5} \dot{W}_{E1a}$. Для освоенной экспериментально области $n \sim 60$ получаем $\dot{W}_{E1} \sim 20 \text{ c}^{-1}$. Если $l \approx 1$ ("линейные орбиты"), то разрешены переходы с большими изменениями n. Поскольку частоты таких переходов могут приближаться к атомным, встает вопрос о выделении основного канала радиационного перехода. Оценим матричный элемент перехода из состояния $|np\rangle$ в основное состояние $|1s\rangle$ при $n \gg 1$. Последнее условие позволяет воспользоваться ВКБ-приближением. ВФ имеет основные максимумы вблизи классических точек поворота, которые определяются уравнением (в атомных единицах)

$$\frac{l^2}{2r^2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2n^2} = 0.$$
 (10)

Основной вклад в матричный элемент дает область $r \le 1$, где значение n не влияет на вид ВФ, а только на ее нормировку. Нормировочный коэффициент для ВФ ВКБ-приближения может быть выражен через спектр [<u>ЕК</u>76, с. 140]:

$$A_n^2 \approx \frac{2m}{\pi\hbar} \cdot \frac{dE_n}{dn}.$$
 (11)

Для ридберговских атомов $A_n^2 \approx n^{-3}$, $d \sim A_n \sim n^{-3/2}$. Полагая $\omega \sim \omega_a$, получаем $\dot{W}_{E1} \sim n^{-3} \dot{W}_{E1a}$. Таким образом, для ридберговских атомов в состояниях "линейных орбит" наиболее вероятны радиационные переходы в состояния, близкие к основному. Скорость таких переходов все еще [<u>ЕК</u>76] - Елютин П.В., Кривченков В.Д. - Квантовая механика (с задачами) - М.: Наука, 1976. - 336 с.

Задача. Можно ли за счет увеличения матричного элемента перехода (радиуса орбиты) добиться того, что скорость спонтанного излучения \dot{W} будет превосходить частоту движения ω ?

§ 27.2 Скорости спонтанных переходов при излучении высших мультипольностей (M1, E2)

• Выражение для скорости спонтанных переходов содержит *ћ* в знаменателе и является существенно квантовым. Выражение для средней мощности дипольного излучения,

$$P = \hbar \omega \dot{W}_{E1} = \frac{4\omega^4}{3c^3} \left| \vec{d}_{nk} \right|^2,$$
 (12)

содержит только величины, имеющие классические аналоги. При использовании принципа соответствия $(\vec{d}_{nk} \sim \vec{d})$ формула для средней мощности совпадает с классической (с точностью до числового коэффициента). Поэтому для оценок скоростей переходов, сопровождаемых излучением других типов, можно исходить из классического выражения для мощности [ЛЛII, §71]

$$P = \frac{2}{3c^3} \ddot{\vec{d}}^2 + \frac{1}{180c^5} \ddot{D}_{\alpha\beta}^2 + \frac{2}{3c^3} \ddot{\vec{m}}^2.$$
(13)

Определение скоростей квантовых переходов делением классических выражений для мощности на *ħ*ω дает достаточно точные оценки.

• Как всегда, высшие члены разложений особенно интересны в отсутствие низших. Излучение определенных типов может быть запрещено правилами отбора. Начнем с классических правил отбора.

О Если система состоит из частиц с одинаковым отношением заряда к массе, e/m = const, то она не может испускать излучение ни дипольного (E1), ни магнитно-дипольного (M1) типов [ЛЛП, §67,71].

В квантовой теории условие e/m = const практически означает тождественность частиц. В этом случае принцип Паули накладывает ограничения на квантовые числа системы. Например, для двух бозонов значение полного момента системы L должно быть четным, а для двух фермионов четность L должна совпадать с четностью полного спина S. Если изменения спина невозможны, то правила отбора квантовой теории запрещают переходы с $\Delta L = \pm 1$ и воспроизводят классическое правило отбора.

Для любой (классической) системы, состоящей из двух частиц, магнитно-дипольное (М1) излучение невозможно. [ЛЛП, §71].

Поэтому в одночастичных моделях квантовых систем обычно рассматривают излучение М1, связанное с переворотом спина [ЛЛІV, §50].

• Оператор магнитно-дипольного взаимодействия имеет вид $\hat{V}_m = -\hat{\vec{m}}\vec{H}$. Используя выражение $\hat{\vec{H}} = \operatorname{rot}\hat{\vec{A}}$ и учитывая ортогональность векторов \vec{k}, \vec{e}_1 и \vec{e}_2 , в силу которой $\vec{k} \times \vec{e}_1 = \pm \vec{k}\vec{e}_2$, для квадрата модуля матричного элемента перехода получаем

$$V_{nk}^{+} = i u \vec{m}_{nk} \left[\vec{k} \vec{e}_{\lambda} \right] \frac{1}{\sqrt{\omega_{nk}}} \,. \tag{14}$$

Полная скорость перехода при магнитно-дипольном излучении равна

$$\dot{W}_{M1} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\vec{m}_{nk}|^2.$$
(15)

Типичный матричный элемент магнитного момента $m_{nk} \sim \alpha d_{nk}$, поэтому типичная скорость *M*1-переходов в α^2 раз меньше скорости *E*1 переходов с той же частотой излученного фотона:

$$\dot{W}_{M1} \sim \alpha^5 \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^3 \left(\frac{m}{\mu_0}\right)^2 \omega_a.$$
 (16)

★ Пример 1. Оценим скорость *M*1-перехода с переворотом спина электрона в магнитном поле Земли ($\mathcal{H} \approx 0.5 \, \Gamma c$). Частота перехода $\omega = 2\mu_0 \mathcal{H}\hbar^{-1} = 8.8 \cdot 10^6 \, c^{-1}$, и скорость перехода \dot{W}_m оказывается ничтожно малой: $\dot{W}_m \sim 8.4 \cdot 10^{-24} \, c^{-1}$. Однако в принципе важно, что за счет радиационных переходов спины (невзаимодействующих) электронов во внешнем магнитном поле стремятся принять одно направление. Это явление *радиационной поляризации* электронов наблюдается при движении релятивистских электронов в сильных магнитных полях [ЛЛIV, §90].

★ Пример 2. Оценим скорость *M*1-перехода между подуровнями сверхтонкой структуры основного состояния в атоме водорода. За счет взаимодействия спиновых магнитных моментов протона и электрона энергии состояний с *F* = 0 и *F* = 1 различаются на величину $\hbar \omega_{hf}$, где $\omega_{hf} = \frac{8}{3} \alpha^2 \zeta \gamma \omega_a$, $\zeta = 1/1836$ есть отношение масс электрона и протона (см. (1.2)), а $\gamma = 2.793$ - отношение магнитного момента протона к ядерному магнетону. По формуле (16) получаем

$$\dot{W}_{M1} \sim 20\gamma^3 \alpha^{11} \zeta^3 \omega_a \approx 9 \cdot 10^{-15} \,\mathrm{c}^{-1}.$$
 (17)

Несмотря на малость этой величины, соответствующее излучение с длиной волны $\lambda = 21$ см легко регистрируется от больших масс межзвездного водорода.

• Квадрупольное (*E*2) излучение контролируется правилами отбора $\Delta l = 0,\pm 2, |\Delta m| \le 2, \Delta S = 0$. На основании (13) приходим к приведенной оценке скорости перехода с квадрупольным излучением:

$$\dot{W}_{E2} \sim \alpha^5 \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^5 \left(\frac{D}{ea_0^2}\right)^2 \omega_a.$$
 (18)

В одноэлектронных системах (атом водорода, щелочные атомы) наряду с E2 - каналом радиационного перехода, как правило, открыты и каналы более быстрого E1 - излучения. Ситуация меняется в многоэлектронных атомах, где переходы между термами одной конфигурации для дипольного излучения запрещены (правилом отбора $\Delta\Sigma l_i = \pm 1$).

★ Пример 3. Оценим скорость *E*2 - перехода между термами ${}^{1}S_{0}$ и ${}^{1}D_{2}$ атома кислорода (конфигурация p^{4}). Разность энергий между этими термами $\Delta E = 2.21$ эВ, и из формулы (18) получаем оценку скорости перехода $\dot{W}_{q} \sim 3 c^{-1}$. Экспериментальное значение $\dot{W}_{q} = 1.4 c^{-1}$.

EOL 💽

ЛЕКЦИЯ #28 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С КВАНТОВАННЫМ ПОЛЕМ - 5

§ 28.1 Скорости спонтанных переходов при сильных запретах

• Рассмотрим спонтанные переходы с уровня $2s_{1/2}$ в атоме водорода. Единственным разрешенным дипольным переходом будет переход на уровень $2p_{1/2}$, который за счет лэмбовского сдвига лежит ниже уровня $2s_{1/2}$. Частота перехода между ними весьма мала, $\omega_L = 0.41\alpha^3\omega_a$; она лишь на порядок превосходит радиационную ширину нижнего уровня $\Gamma_{2p} = 0.039\alpha^3\omega_a$. Скорость такого перехода по оценке (27.8) имеет величину $\dot{W}_d \approx 0.07\alpha^{12}\omega_a$. Количественный расчет приводит к значению $\dot{W}_d = 0.83\alpha^{12}\omega_a = 7.8 \cdot 10^{-10} \text{ c}^{-1}$.

• Другим возможным процессом перехода является магнитный дипольный переход между уровнями $2s_{1/2}$ и $1s_{1/2}$. Частота перехода $\omega_t = 0.375\omega_a$ порядка атомной, но матричный элемент этого перехода весьма мал. Поскольку орбитальный момент электрона и в начальном, и в конечном состоянии равен нулю, то $l_{nk} = 0$ и переход определяется оператором спинового момента. Однако при вычислении значения \vec{m}_{nk} по формуле

$$\vec{m}_{nk} = \langle \chi_k | \mu_0 \hat{\vec{\sigma}} | \chi_n \rangle \cdot \int \psi_{1s}(\vec{r}) \psi_{2s}(\vec{r}) d\vec{r}$$
(1)

с помощью нерелятивистских волновых функций $\psi_{1s}(\vec{r})$ и $\psi_{2s}(\vec{r})$ интеграл обращается в ноль из-за их ортогональности. Отличным от нуля значение интеграла становится при добавлении к гамильтониану оператора релятивистских поправок \hat{V}_R , учитывающего релятивистскую зависимость энергии от импульса, контактное и спин-орбитальное взаимодействия. Характерная величина матричных элементов этого оператора в атомных единицах порядка α^2 . Поэтому значение коэффициентов при волновых функциях, добавляемых к исходной в первом порядке теории возмущений, а с ними и входящего в выражение для \vec{m}_{nk} интеграла будет порядка α^2 , и матричный элемент рассматриваемого перехода $|\vec{m}_{nk}| \sim \mu_0 \alpha^2$. По формуле (27.16) получаем оценку $\dot{W}_m \approx 5.3 \cdot 10^{-2} \alpha^9 \omega_a$. Количественный расчет дает значение $\dot{W}_m = 1.03 \cdot 10^{-3} \alpha^9 \omega_a = 2.49 \cdot 10^{-6} c^{-1}$.

★ Практически все сильно запрещенные переходы оказываются разрешены в высших приближениях - при уточнении исходной модели (эвристика "Pinafore", §25.2). Чаще всего роль снимающих запреты возмущений играют оператор релятивистских поправок $\hat{V}_{rel} \sim \alpha^2$ и оператор сверхтонкого взаимодействия $\hat{V}_{hl} \sim \alpha^2 \zeta$. Наблюдение сильно запрещенных переходов требует особых условий: атом должен оставаться изолированным в течение времени, сравнимого со временем радиационного распада. Такие условия существуют во внешних слоях атмосферы небесных тел (высокие слои ионосферы Земли, корона Солнца) и в межзвездном пространстве. Третий фактор, ведущий к снятию запретов - наложенное на систему внешнее (обычно электрическое) поле.

• Значительно более вероятным, чем рассмотренные выше процессы, является переход из состояния $2s_{1/2}$ в состояние $1s_{1/2}$ с одновременным испусканием двух фотонов. Такой процесс может быть описан во втором порядке теории возмущений по оператору \hat{V}_1 как переход $2s \rightarrow np$ с испусканием фотона частоты ω_1 и последующий переход $np \rightarrow 1s$ с испусканием фотона частоты ω_2 .

 \Rightarrow Задача. Можно ли описать этот процесс в первом порядке теории возмущений по оператору \hat{V}_2 ?

Частоты фотонов должны удовлетворять соотношению $\omega_1 + \omega_2 = \omega_t$. Скорость такого перехода может быть вычислена с помощью золотого правила Ферми. В конечном состоянии системы имеется два фотона, связанных только условием постоянства суммарной энергии. Плотность конечных состояний имеет вид

$$\rho(E_k) = \rho_1(\hbar\omega_1)\rho_1(\hbar\omega_2)d(\hbar\omega_1).$$
(2)

В составном матричном элементе надо учесть, что при переходе $2s \rightarrow np$ может быть испущен как фотон ω_1 , так и фотон ω_2 . Составной матричный элемент принимает вид

$$\widetilde{V}_{nk}^{(2)} = \sum_{i} \left[\frac{V_{ki}^{+} V_{in}^{+}}{E_{ni} - \hbar \omega_{1}} + \frac{V_{ki}^{+} V_{in}^{+}}{E_{ni} - \hbar \omega_{2}} \right].$$
(3)

Используя явный вид оператора взаимодействия \hat{V}_1^+ в дипольном приближении (27.2), имеем для составного матричного элемента выражение

$$\widetilde{V}_{nk}^{(2)} = \frac{u^2 \sqrt{\omega_1 \omega_2}}{c^2 \hbar} \sum_i \left[\frac{\left(\vec{d}_{ki} \vec{e}_1 \right) \left(\vec{d}_{in} \vec{e}_2 \right)}{\omega_{ni} - \omega_1} + \frac{\left(\vec{d}_{ki} \vec{e}_2 \right) \left(\vec{d}_{in} \vec{e}_1 \right)}{\omega_{ni} - \omega_2} \right], \tag{4}$$

где \vec{e}_1 и \vec{e}_2 - векторы поляризации фотонов ω_1 и ω_2 . Выражение для вероятности переходов получается подстановкой $\rho(E_k)$ и $\tilde{V}_{nk}^{(2)}$ в ЗПФ:

$$\dot{W}_{d2} = \left|\Sigma_{nk}\right|^2 \frac{\omega_1^3 \omega_2^3}{\left(2\pi\right)^3 c^6 \hbar^2} d\Omega_1 d\Omega_2 d\omega_1.$$
(5)

Здесь через Σ_{nk} обозначена сумма, входящая в составной матричный элемент.

• Оценим скорость двухфотонного перехода. Плотность конечных состояний имеет максимум при $\omega_1 = \omega_2 = \omega_t/2$. Поэтому для оценки Σ_{nk} можно принять не зависящее от частот фотонов выражение

$$\Sigma_{nk} \approx 2 \frac{\left(\vec{d}_s \vec{e}_1\right) \left(\vec{d}_s \vec{e}_2\right)}{\left(\omega_t/2\right)} \tag{6}$$

Интегрируя по углам и суммируя про поляризациям, получаем выражение для скорости двухфотонного перехода с испусканием фотона в спектральном интервале $d\omega_1$ вблизи частоты ω_1 :

$$\dot{W}_{d2} = \frac{128}{9\pi} \cdot \frac{d_s^4 \omega_1^3 \omega_2^3}{\omega_t^2 \hbar^2 c^6} d\omega_1.$$
(7)

Интегрируя это выражение по частоте от $\omega_1 = 0$ до $\omega_1 = \omega_t$, получаем оценку для скорости спонтанного двухфотонного перехода:

$$\dot{W}_{d2} = \frac{32}{315\pi} \alpha^6 \left(\frac{\omega_t}{\omega_a}\right)^5 \omega_a.$$
(8)

Подставляя сюда значение частоты перехода $\omega_t = 0.375\omega_a$, получаем числовую оценку $\dot{W}_{d2} = 1.5 \text{ c}^{-1}$. Первый количественный расчет [BT40] привел к значению $\dot{W}_{d2} = 7.6 \pm 1.1 \text{ c}^{-1}$. Более точные расчеты дают значение $\dot{W}_{d2} = 8.226 \text{ c}^{-1}$ [<u>3P</u>68].

- [BT40] G.Breit and E. Teller Metastability of Hydrogen and Helium Levels. Astrophys. J., 1940, vol. 91, p.215-238
- [<u>3Р</u>68] Зон Б.А., Раппопорт Л.П. Двухфотонный распад 2s-уровня водорода Письма в ЖЭТФ, 1968, т. 7, № 26 сс. 70-72

§ 28.2 Естественная форма линии

• Механизм спонтанного излучения делает возбужденное состояние атома нестационарным. Как следствие это состояние не имеет определенной энергии, а потому испущенные атомом фотоны не строго моно-хроматичны, а имеют спектральное распределение конечной ширины. Форма линии такого распределения может быть определена в предположении экспоненциальной скорости распада амплитуды начального состояния:

$$B(t) = e^{-\gamma t}, \qquad (9)$$

где $\gamma = \dot{W}/2$ - половина скорости распада вероятности состояния. Для перехода в основное (стационарное) состояние с использованием расчетов §3.3 получается

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2},$$
(10)

где $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$ есть частота перехода. Это выражение, описывающее *естественную форму линии*, было впервые получено Лоренцем на основе классической теории излучения [L15]. Форма линии (10) называется *лоренцевой*. Такой же результат был получен Вайскопфом и Вигнером на основе квантовой теории [WW30], со значением параметра

$$2\gamma = \dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nk}|^2 \rho(E_k).$$
(11)

[L15] H.A. Lorentz
 The width of spectral lines
 Proc. KNAW, 1915, vol. 18, pt. I, pp. 134 – 150.

[WW30] V. Weisskopf, E. Wigner Berechnung fer natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie Z. Phys., 1930, Bd. 63, Heft 1-2, S. 54 – 73.

• Выражение (10) с высокой точностью описывает форму линии спонтанного излучения вблизи частоты перехода ω_0 . Однако теоретически это выражение неудовлетворительно: средняя энергия излученного фотона оказывается бесконечной. Более того, выражение (10) получено на основе золотого правила Ферми, при выводе которого предполагалось, что матричный элемент и плотность состояний можно взять постоянными, равными их значению на резонансной частоте ω_0 . Уточнение расчета требует учета зависимости от частоты как матричного элемента ($V \sim \sqrt{\omega}$, см. (27.3)), так и плотности состояний ($\rho \sim \omega^2$, см. (27.4)). В итоге получается выражение [PZ59]

$$S'(\omega) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^3, \qquad (12)$$

которое не может быть нормировано и потому вообще не является распределением.

[PZ59] E.A. Power, S. Zienaw

Coulomb gauge in non-relativistic quantum electrodynamics and the shape of spectral lines Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 1959, vol. 251, no.999, pp. 427 – 454.

Причина этих трудностей состоит в нефизическом начальном условии: принимается, что атом начинает излучать после мгновенного возбужде-

ния. В результате амплитуда возбужденного состояния претерпевает скачок, что по формуле (2.30) влечет слишком медленное убывание ВЧ асимптотики спектра. В реальности возбуждение атома занимает конечное время.

• Рассмотрим возбуждение двухуровневого атома π -импульсом, переводящим систему из основного в возбужденное состояние. Гамильтониан системы возьмем в виде $\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{V}_q + \hat{V}_c + \hat{H}_F$, где \hat{H}_a - гамильтониан двухуровневого атома, \hat{H}_F - гамильтониан квантованного поля, оператор $\hat{V}_q = \sum_{\lambda} (\hat{v}_{\lambda} + \hat{v}_{\lambda}^+)$, где

$$\hat{v}_{\lambda} = i \frac{u}{c} \hat{\vec{de}}_{\lambda} \sqrt{\omega_{\lambda}} \hat{a}_{\lambda}^{+} e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$
(13)

описывает взаимодействие с квантованным полем излучения, а

$$\hat{V}_c = -\vec{d}\vec{E}(t)\cos\omega_0 t \tag{14}$$

– воздействие на атом квазимонохроматического импульса поля резонансной частоты (поля накачки); $\vec{E}(t)$ описывает огибающую электрического поля импульса.

Вектор состояния системы может быть представлен в виде разложения

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = A\left|1, \mathbf{V}\right\rangle e^{-i\omega_{1}t} + B\left|2, \mathbf{V}\right\rangle e^{-i\omega_{2}t} + \sum_{\lambda} C_{\lambda}\left|1, \lambda\right\rangle e^{-i(\omega_{1}+\omega_{\lambda})t}, \quad (15)$$

где $|j, V\rangle$ означает состояние системы с атомом в состоянии $|j\rangle$ и полем в вакуумном состоянии; в состоянии $|1,\lambda\rangle$ атом находится в основном состоянии $|1\rangle$, один фотон присутствует в моде $|\lambda\rangle$, и нет фотонов в других модах.

Эволюция системы описывается системой уравнений

$$i\frac{dA}{dt} = B\Omega(t)\cos\omega_0 t \,e^{-i\omega_0 t} \tag{16}$$

$$i\frac{dB}{dt} = A\Omega(t)\cos\omega_0 t \, e^{i\omega_0 t} + \sum_{\lambda} u_{\lambda} C_{\lambda} e^{i\Delta_{\lambda} t}$$
(17)

$$i\frac{dC_{\lambda}}{dt} = u_{\lambda}Be^{-i\Delta_{\lambda}t} \tag{18}$$

где $\Omega(t) = -\vec{d}_{12}\vec{E}(t)/\hbar$, \vec{d}_{12} - матричный элемент дипольного момента между атомными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$,

$$u_{\lambda} = i \frac{u}{c} \vec{d}_{12} \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\omega_{\lambda}}$$
(19)

и $\Delta_{\lambda} = \omega_0 - \omega_{\lambda}$ - расстройка между частотами атомного перехода и испущенного фотона.

Рассмотрим π - импульс прямоугольной формы

$$\Omega(t) = \Omega$$
 при $-\frac{\pi}{\Omega} < t < 0$, иначе $\Omega(t) = 0$ (20)

и положим, что частота Раби много больше скорости спонтанного излучения, $\Omega \gg \gamma$. Поэтому во время действия π - импульса можно пренебречь влиянием спонтанного излучения и учесть только поле накачки. Тогда из уравнений (16) и (17) с начальными условиями $A(-\pi/\Omega)=1$, $B(-\pi/\Omega)=0$ в приближении вращающегося поля получаем

$$B(t) = -i\cos\frac{\Omega}{2}t \quad \left(-\frac{\pi}{\Omega} < t < 0\right). \tag{21}$$

Вторую стадию, спонтанное излучение возбужденного атома, можно описать экспоненциальным распадом (9):

$$B(t) = -ie^{-\gamma t} \quad (t > 0).$$
(22)

Эти выражения имеют точность порядка γ/Ω , которой достаточно для наших целей.

Подстановкой выражений (21) и (22) в уравнение (18) и последующим интегрированием получим предельные значения амплитуд однофотонных состояний

$$C_{\lambda}(\infty) = -u_{\lambda}F(\omega_{\lambda}), \qquad (23)$$

где спектральная амплитуда дается выражением

$$F(\omega) = \frac{2\Omega \exp\left(i\frac{\pi\Delta}{\Omega}\right) - 4i\Delta}{\Omega^2 - 4\Delta^2} + \frac{1}{i\Delta + \gamma}$$
(24)

Во-первых, следует отметить, что первый член в правой части регулярен при $\Delta = \pm \Omega/2$, поскольку в этой точке и числитель, и знаменатель имеют простые нули. Во-вторых, для малых расстроек $|\Delta| \leq \Omega$ в правой части доминирует второй член, и форма линии дается стандартной лоренцевой формой (10). В-третьих, при больших расстройках $|\Delta| \gg \Omega \gg \gamma$ при разложении обоих членов по отрицательным степеням Δ два слагаемых порядка Δ^{-1} сокращаются. Асимптотика спектральной амплитуды в этой области имеет вид

$$F(\omega) \approx -\frac{\Omega}{2} \exp\left(i\frac{\pi\Delta}{\Omega}\right)\Delta^{-2},$$
 (25)

что дает для асимптотики спектральной плотности излучения

$$S(\omega) \approx \frac{\gamma}{4\pi} \frac{\Omega^2}{\Delta^4}$$
(26)

Разумеется, форма спектра зависит от формы возбуждающего импульса. Нетрудно провести, например, расчеты для π-импульса с синусной огибающей

$$\Omega(t) = -\frac{\pi}{2}\Omega\sin\Omega t \quad \text{при} \quad -\frac{\pi}{\Omega} < t < 0 \text{, иначе } \Omega(t) = 0.$$
(27)

Соответствующие формы линии показаны на рисунке.



Зависимость логарифма спектральной плотности $\ln S$ от относительной расстройки частоты Δ/γ для частоты Раби $\Omega = 10\gamma$. Сплошная линия – лоренцева форма (10), штриховая линия соответствует π импульсу с прямоугольной огибающей (20), пунктирная - π - импульсу с синусной огибающей (27).

Видно, что для обеих форм импульса переход от лоренцевой формы линии к быстро спадающей асимптотике происходит при $\Delta \approx \Omega$.

§ 28.3 Спонтанное излучение в резонаторе

• Свойства спонтанного излучения зависят от свойств вакуума электромагнитного поля. Последние могут быть изменены введением материальных границ, модифицирующих структуру мод поля (ср. §25.1). Простейшим примером является спонтанное излучение возбужденного атома, помещенного в резонатор.

Впервые такая задача была рассмотрена Пёрселлом [Р46]. Он отметил, что если излучатель находится в точном резонансе с модой резонатора с добротностью Q, то число мод (данной поляризации) на единицу объема поля и единичный частотный интервал, присущую свободному пространству,

$$N = 4\pi \frac{\omega^2}{\left(2\pi c\right)^3},\tag{28}$$

надо заменить на 1 моду в объеме резонатора V в частотном интервале v/Q. Скорость спонтанного излучения увеличится (это явление называется эффектом Пёрселла) на фактор

$$f = \frac{3}{4\pi^2} \cdot \frac{Q\lambda^3}{V}$$
(29)

В кубическом резонаторе с ребром *L* на частоте основного колебания $\omega_0 = 2\pi\sqrt{2} c/L$ этот фактор принимает значение $f = 3Q/8\pi^2\sqrt{2} = 0.0269Q$. Сверхпроводящие резонаторы для частот дециметрового диапазона ($\nu \sim 1 \Gamma \Gamma \mu$) могут иметь значения добротности до $Q \sim 3 \cdot 10^{10}$.

[P46] E.M. Purcell

Spontaneous emission probabilities at radio frequencies. Phys. Rev., 1946, vol. 69, no. 11-12, p. 681.

Напротив, если частота излучателя лежит между частотами мод резонатора (в частности, ниже критической частоты), то это приведет к замедленному спонтанному излучению (*inhibited spontaneous emission*).

• Оценим условия, при которых дискретность спектра резонатора скажется на кинетике спонтанного излучения.

Переходы с излучением фотона свободного поля $(L \to \infty)$ происходят с постоянной скоростью. Нестационарность начального состояния ведет к возникновению уширения линии излучения - форма линии становится приблизительно лоренцевой с шириной $\gamma = \dot{W}/2$. Если поле ограничено резонатором, то его спектр можно рассматривать как квазинепрерывный только до тех пор, пока спектральный интервал между модами существенно меньше ширины линии. Этот интервал для кубического резонатора с ребром *L* вблизи частоты ω есть

$$\Delta \omega = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\lambda}{L}\right)^3 \omega, \qquad (30)$$

где $\lambda = 2\pi c \omega^{-1}$ - длина волны излучения. В оптическом диапазоне при значениях L = 1 см и $\lambda = 10^{-4}$ см получаем $\Delta \omega = 8 \cdot 10^{-14} \omega$, и в спектральной полосе излучения шириной $\gamma \sim \alpha^3 \omega^3 \omega_a^{-2} \sim 7 \cdot 10^{-10} \omega$ лежат $N = \gamma / \Delta \omega \sim 10^4$ уровней.

• Иная ситуация может сложиться для высоковозбужденных атомов. Рассмотрим ридберговский атом в состоянии с главным квантовым числом $n \gg 1$ типа "круговая орбита" ($l \approx n$). Для него ширина линии перехода

$$\gamma \sim \alpha^3 \omega_a n^{-5} \tag{31}$$

(см. § 27.1). Спектральный интервал между модами вблизи частоты излучения такого атома может быть записан в виде

$$\Delta \omega = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\lambda_0}{L}\right)^3 n^6 \omega_a, \qquad (32)$$

где $\lambda_0 = 2\pi c \omega_a^{-1} = 45$ нм. Из условия $\Delta \omega = \gamma$ получаем значение квантового числа *n*, при котором станет существенной дискретность частотного спектра резонатора:

$$n_d \approx 1.26 \left(\frac{\alpha L}{\lambda_0}\right)^{3/11}$$
 (33)

При L = 1 см получаем $n_d \approx 9.5$. Таким образом, уже для ридберговских атомов со сравнительно небольшими *n* создаются условия, при которых радиационное взаимодействие атома осуществляется с небольшим числом мод резонатора и спонтанное излучение замедлено (это напоминает случай термостата с небольшим числом степеней свободы, обсуждавшийся в §19.2).

★ Предложение наблюдать эффект замедления спонтанного излучения с помощью ридберговских атомов в «круговых» состояниях, движущихся в волноводах, было сделано Клепнером [K81] и вскоре осуществлено [HHK85]. В этих опытах использовались атомы с n = 22. Наблюдалось увеличение времени жизни атома не менее чем в 20 раз.

[K81] D. Kleppner
 Inhibited Spontaneous Emission
 Phys. Rev. Lett., 1981, vol. 47, no. 4, pp. 233–236

[HHK85] R.G. Hulet, E.S. Hilfer, and D. Kleppner Inhibited Spontaneous Emission by a Rydberg Atom Phys. Rev. Lett., 1985, v. 55, no. 20, pp. 2137–2140

EOL 🔍

ЛЕКЦИЯ #29 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С КВАНТОВАННЫМ ПОЛЕМ - 6

TEST #12

§ 29.1 Тормозное излучение

• При рассмотрении спонтанных однофотонных переходов между состояниями дискретного энергетического спектра системы S энергетический спектр испущенных фотонов также дискретен: он определяется значениями энергий уровней системы E_k , лежащих ниже начального уровня E_n . Для переходов в состояния непрерывного энергетического спектра возможны процессы с испусканием фотона любой энергии в интервале $E_n \ge \hbar \omega \ge 0$. Поэтому процесс такого спонтанного перехода следует описывать дифференциальным сечением $d\sigma$ перехода с испусканием одного фотона в заданном интервале энергий и углов $d(\hbar \omega) d\Omega$.

Легко оценить порядок величины такого сечения. Задача может быть характеризована двумя безразмерными переменными - долей начальной энергии электрона, перешедшей в излучение,

$$x = \frac{\hbar\omega}{E_n},\tag{1}$$

и отношением начальной энергии электрона к атомному масштабу,

$$y = 2\frac{E_n}{E_a}.$$
 (2)

Поскольку оператор излучения одного фотона в дипольном приближении \hat{V}^+ не зависит от скорости света c (см. §27.1), зависимость $d\sigma$ от α определяется только вкладом плотности конечных состояний фотона (она пропорциональна α^3). В итоге

$$d\sigma = \alpha^3 a_0^2 f(x, y) \frac{d\omega}{\omega} d\Omega, \qquad (3)$$

где f(x, y) - неизвестная функция (такая, что при $x, y \sim 1$ также $f \sim 1$).

★ Сечения процессов, разрешенных в дипольном приближении, зависят от постоянной тонкой структуры очевидным образом. Каждый начальный (поглощенный или рассеянный) фотон вносит в сечение множитель α , поскольку сечение получается делением на плотность потока фотонов, пропорциональную *C*, а каждый конечный (испущенный) - множитель α^3 , поскольку плотность состояний для фотонов пропорциональна c^{-3} . Матричные элементы оператора взаимодействия с квантованным электромагнитным полем (25.26), (27.2) от скорости света не зависят. Для примера сошлемся на сечение однофотонной ионизации $\sigma \sim \alpha$ (4.9) и на сечение (нерезонансного) рассеяния света на атоме $\sigma \sim \alpha^4$ (2.4).

• Свободный электрон не может испустить фотон. Спонтанное излучение при переходе между состояниями непрерывного спектра - оно на-

'10

$$\psi_n = \exp i \frac{\vec{p}_1 \vec{r}}{\hbar}, \quad \psi_k = \exp i \frac{\vec{p}_2 \vec{r}}{\hbar}.$$
(4)

Эти функции будем считать подчиненными тому же условию периодичности на гранях куба с ребром L = 1, что и моды электромагнитного поля. В нашей задаче оператор возмущения имеет вид $U(\vec{r}) + \hat{V}^+$; оператор излучения \hat{V}^+ мы возьмем в виде

$$\hat{V}^{+}(t) = -\frac{eu}{mc} \hat{\vec{p}} \sum_{\lambda} \frac{\vec{e}_{\lambda}}{\sqrt{\omega_{\lambda}}} \hat{a}_{\lambda}^{+} e^{-i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)}.$$
(5)

Используя дипольное приближение, далее будем полагать в этом выражении $\vec{k} = 0$. Интересующий нас процесс излучения при рассеянии описывается составным матричным элементом второго порядка теории возмущений

$$\widetilde{V}_{kn}^{(2)} = \sum_{i} \frac{U_{ki} V_{in}^{+}}{E_n - E_i} + \sum_{j} \frac{V_{kj}^{+} U_{jn}}{E_n - E_j}.$$
(6)

Энергии начального и конечного состояния системы "электрон + фотон" должны быть равны, поэтому

$$E_n = \frac{p_1^2}{2m} = E_k = \frac{p_2^2}{2m} + \hbar\omega.$$
 (7)

Входящие в (6) компоненты вычисляются элементарно. Для оператора излучения в дипольном приближении отличен от нуля только матричный элемент перехода в состояние с тем же импульсом ($\vec{p}_i = \vec{p}_1$):

$$\left\langle \vec{p}_{i},\vec{k}\left|\hat{V}^{+}\right|\vec{p}_{1},0\right\rangle = -\frac{eu}{mc}\cdot\frac{\vec{e}_{1}\vec{p}_{1}}{\sqrt{\omega_{\lambda}}}$$
(8)

Матричный элемент оператора $U(\vec{r})$ есть

$$\langle \vec{p}_2 | U(\vec{r}) | \vec{p}_1 \rangle = \int U(\vec{r}) \exp i \frac{\vec{q}\vec{r}}{\hbar} d\vec{r}$$
 (9)

где $\vec{q} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ есть изменение импульса электрона при рассеянии (ср. §23.3). Неизменность импульса электрона при взаимодействии с полем приводит к тому, что в составном матричном элементе вклад в сумму по промежуточным состояниям дадут только состояния с $\vec{p}_i = \vec{p}_1$ и $\vec{p}_j = \vec{p}_2$; поэтому

$$E_n - E_i = -\hbar\omega, \quad E_n - E_j = \hbar\omega.$$
 (10)

Итак, $\widetilde{V}_{kn}^{(2)}$ зависит только от величины переданного импульса:

$$\tilde{V}_{kn}^{(2)} \approx -\frac{eu}{mc} \cdot \frac{\vec{e}_1 \vec{q}}{\hbar \omega^{3/2}} A(\vec{q})$$
(11)

В конечном состоянии системы имеются две частицы в состояниях непрерывного спектра - электрон и фотон. Возможные состояния этих частиц ограничены только законом сохранения энергии. Поэтому плотность конечных состояний имеет вид

$$\rho(E_k) = \rho_2(E_k - \hbar\omega)\rho_1(\hbar\omega)d\hbar\omega, \qquad (12)$$

где $\rho_2(E)$ есть плотность состояний электрона,

$$\rho_2(E) = \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\left(2\pi\hbar\right)^3} d\Omega_e, \qquad (13)$$

а $\rho_1(\hbar\omega)$ - плотность состояний фотона,

$$\rho_1(\hbar\omega) = \frac{\omega^2}{\hbar(2\pi c)^3} d\Omega_{ph}.$$
 (14)

Формулы (11) и (12) вместе с золотым правилом Ферми (3.8) определяют дифференциальное сечение тормозного излучения.

• Подстановка выражений для составного матричного элемента и плотности состояния в золотое правило Ферми дает выражение для скорости перехода

$$\dot{W} = \frac{1}{16\pi^4} \cdot \frac{e^2 p_2}{\hbar^5 m c^3 \omega} \sum_{1,2} \left(\vec{e}_n \vec{q}\right) \left| A(\vec{q}) \right|^2 d\Omega_e d\Omega_{ph} d\omega \,. \tag{15}$$

Сечение перехода определяется как отношение скорости перехода к плотности потока электронов J в начальном состоянии $J = p_1/m$. Итак, сечение перехода, при котором электрон рассеивается в элементарный телесный угол $d\Omega_e$, а фотон с частотой в интервале $d\omega$ вблизи частоты ω излучается в телесный угол $d\Omega_{ph}$, дается формулой

$$d\sigma = \frac{1}{16\pi^4} \cdot \frac{e^2 p_2}{\hbar^5 c^3 p_1 \omega} \sum_{1,2} (\vec{e}_n \vec{q})^2 |A(\vec{q})|^2 d\Omega_e d\Omega_{ph} d\omega.$$
(16)

Определим спектральное сечение тормозного излучения $d\sigma_{\omega}$ - сечение рассеяния с испусканием фотона в интервале частот $d\omega$. Выражение для $d\sigma_{\omega}$ получится интегрированием выражения (16) по четырем угловым переменным. Три интегрирования могут быть проведены в общем виде; в итоге

$$d\sigma_{\omega} = \frac{1}{3\pi^2} \cdot \frac{e^2 p_2}{\hbar^5 c^3 p_1 \omega} \int \left| A(\vec{q}) \right|^2 q^2 d\cos\theta \, d\omega \,, \tag{17}$$

где θ - угол рассеяния электрона.

Рассмотрим практически важный случай рассеяния на кулоновском потенциале $U(r) = -Ze^2r^{-1}$. Для этого случая

$$A(q) = -4\pi Z e^2 \hbar^2 q^{-2}, \qquad (18)$$

и оставшееся интегрирование по θ тоже элементарно:

$$d\sigma_{\omega} = \alpha^3 a_0^2 \left[\frac{16}{3} Z^2 \frac{1}{y} \ln\left(\frac{1+\sqrt{1-x}}{1-\sqrt{1-x}}\right) \right] \frac{d\omega}{\omega}, \quad (19)$$

где $x = \hbar \omega / E_n$ и $y = 2E_n / E_a$ суть введенные ранее безразмерные переменные. При $\omega \to 0$ спектральное сечение растет как $\omega^{-1} |\ln \omega|$, а при приближении энергии испущенного кванта к начальной энергии электрона, $x \to 1$, $d\sigma_{\omega}$ стремится к нулю как $\sqrt{1-x}$.



Зависимость спектрального сечения тормозного излучения от $x = \hbar \omega / E_n$ в борновском приближении.

• Если энергия электрона в конечном состоянии $E_f = p_2^2/2m$ не велика в сравнении с характерной атомной энергией E_a (а это всегда будет так при $x \to 1$), то применение борновского приближения некорректно. Вычисление с помощью точных ВФ в кулоновском потенциале притяжения приводит в области $E_n \gg \hbar \omega_a$, $E_f \ll \hbar \omega_a$ к формуле

$$d\sigma_{\omega} = \alpha^{3} a_{0}^{2} \left[\frac{64\pi}{3} Z^{3} \frac{1}{y^{3/2}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{2\pi Z}{\sqrt{y(1-x)}}\right) \right\}^{-1} \right] \frac{d\omega}{\omega}.$$
 (20)

★ При $y(1-x) \gg 1$ функции в прямоугольных скобках в формулах (19) и (20) имеют одинаковую асимптотику. Поэтому при $y \gg 1$ эти формулы позволяют описать весь спектр тормозного излучения.

При $x \to 1$ выражение (20) стремится к конечному пределу

$$d\sigma = \frac{32\pi}{3} Z^2 \alpha^3 a_0^2 y^{-3/2} \frac{d\omega}{\omega}.$$
 (21)

• Сечение рассеяния с излучением фотона вычислялось как поправка второго порядка теории возмущений к сечению рассеяния без испускания фотонов, которое имеет в борновском приближении вид

$$d\sigma_B = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| A(\vec{q}) \right|^2 d\Omega_2.$$
(22)

С использованием этого выражения формула для сечения тормозного излучения может быть переписана в виде

$$d\sigma = d\sigma_B \alpha \frac{p_2}{4\pi^2 p_1} \cdot \frac{d\omega}{\omega} \sum_{1,2} \left(\frac{\vec{e}_n \vec{q}}{mc}\right)^2 d\Omega_{ph}$$
(23)

Вероятность рассеяния с испусканием одного фотона определяется интегралом по $d\omega$, логарифмически расходящимся на нижнем пределе и оказывается бесконечной. Эта расходимость называется *инфракрасной катастрофой* и отражает неприменимость теории возмущений для описания низкочастотного излучения.

★ Практических трудностей инфракрасная катастрофа не вызывает, так как в экспериментах фиксируется лишь излучение с частотой выше некоторого порога, $\omega > \omega_L$. Для того, чтобы вероятность рассеяния с испусканием одного фотона в интервале частот от ω_L до $\omega_H = E_n/\hbar$ стала сравнима с вероятностью упругого рассеяния, величину ω_L следует взять ничтожно малой:

$$\omega_L \sim \omega_H \exp\left(-\alpha^{-3} \frac{\hbar \omega_a}{E_n}\right).$$
 (24)

Даже при $E_n = mc^2$ это дает $\omega_L \sim 10^{-39} \text{ c}^{-1}$. Период осцилляций такого поля примерно в 10^{22} раз больше возраста Вселенной.

§ 29.2 Тормозное излучение: сравнение с классической теорией

• В классической электродинамике задача о тормозном излучении при (нерелятивистском) движении в кулоновском поле ставится как задача об определении спектрального распределения и полной энергии ΔE излучения частицы, движущейся по заданной траектории – по траектории с заданным прицельным параметром ρ с заданной на бесконечности скоростью v [ЛЛІІ, §70]. Для описания излучения при рассеянии пучка частиц на неподвижный потенциальный центр представляет интерес

$$\kappa = \int_{0}^{\infty} \Delta E(\rho) 2\pi \rho d\rho.$$
 (25)

Величину эффективного излучения в классической теории легко оценить по соображениям размерности, построив из параметров *e*,*m*,*v*,*c* величину с размерностью $[\kappa] = EL^2$, пропорциональную c^{-3} : для Z = 1

$$\kappa = \# \frac{e^4 v}{mc^3}.$$
 (26)

★ Количественные расчеты для тормозного излучения в потенциале отталкивания дают значение числовой константы $\# = 8\pi/9$ [ЛЛІІ, §70, задача 3]. В потенциале притяжения эффективное излучение оказывается бесконечным (почему?)

• В квантовой теории эффективное излучение может быть определено как интеграл от энергии кванта по спектральному сечению тормозного излучения,

$$\kappa = \int_{0}^{\Omega} \hbar \omega \, d\sigma_{\omega} \,, \tag{27}$$

где верхний предел частоты излучения $\Omega = E_n/\hbar$. Используя формулу борновского приближения (19), получаем

$$\kappa = \frac{8}{3} \alpha^3 a_0^2 E_a \int_0^1 x \ln\left(\frac{1+\sqrt{1-x}}{1-\sqrt{1-x}}\right) \frac{dx}{x}.$$
 (28)

Учитывая численное значения интеграла (равное двум), приходим к выражению

$$\kappa = \# \frac{e^6}{mc^3\hbar}.$$
 (29)

где # = 16/3 (вне зависимости от знака потенциала). Связь между классическим, κ_c (26) и квантовым, κ_q (29) эффективными излучениями может быть представлена в форме

$$\kappa_q \sim \kappa_c \frac{v_a}{v},$$
(30)

где $v_a = e^2/\hbar$ - атомный масштаб скорости.

EOL 🖸

ЛЕКЦИЯ #30 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С КВАНТОВАННЫМ ПОЛЕМ - 7

• Выше рассматривались, в основном, те процессы, которые в принципе могли происходить и при вакуумном начальном состоянии поля. Перейдем к рассмотрению другого класса - процессов *рассеяния:* переходов, при которых исчезает один фотон моды λ_1 и испускается фотон моды λ_2 . Поскольку при рассеянии изменяются состояния двух мод поля, то описание такого процесса требует, как минимум, описания процессов во втором порядке теории возмущений по оператору $\hat{V_1}$ и/или в первом порядке по оператору $\hat{V_2}$.

§ 30.1 Рассеяние света на свете в вакууме

• Простейшим в физическом смысле является процесс рассеяния света на свете в вакууме. Оценим величину сечения этого процесса, построив феноменологический оператор $\hat{V_{\gamma}}$ взаимодействия низкочастотных $(\hbar\omega \ll mc^2)$ фотонов. В квантовой теории характерный масштаб напряженности поля, ограничивающий применимость линейных уравнений поля в вакууме, равен

$$\mathcal{E}_{NL} = \frac{m^2 c^3}{e\hbar} = 4.44 \cdot 10^{13} \,\,\Gamma c\,. \tag{1}$$

Он называется *швингеровским полем*. В поле такой напряженности работа по перемещению электрона на расстояние, равное комптоновской длине волны $\lambda_c = \hbar/mc$, сравнима с пороговой энергией рождения электрон-позитронной пары:

$$A = e \mathcal{E}_{NL} \lambda_c = mc^2.$$
⁽²⁾

Структура оператора взаимодействия фотонов \hat{V}_{γ} определяется следующими соображениями.

Оператор \hat{V}_{γ} должен иметь размерность плотности энергии - как и оператор плотности энергии свободного электромагнитного поля (см. §24.3).

2 Оператор \hat{V}_{γ} должен быть скаляром, поэтому он может зависеть только от функций \vec{H}^2 , \vec{E}^2 и $(\vec{E}\vec{H})^2$.

Э Взаимодействие фотонов возникает в результате редукции взаимодействия электромагнитного поля и виртуальных электронпозитронных пар. Поэтому заряд электрона e и напряженности полей должны входить в \hat{V}_{γ} в одинаковых степенях.

• При изменении знака заряда электрона физическая картина мира останется неизменной. Поэтому масштаб нелинейности \mathscr{E}_{NL} должен входить в \hat{V}_{γ} в четной степени.

Предполагая, что оператор \hat{V}_{γ} обладает минимальной нелинейностью - пропорционален четвертой степени поля, для типичного члена получаем оценку

$$\hat{V}_{\gamma} \sim \alpha \frac{\mathcal{E}^4}{\mathcal{E}_{NL}^2}.$$
(3)

Матричный элемент этого оператора, соответствующий процессу рассеяния фотона на фотоне, имеет порядок величины

$$V_{\gamma} \sim \alpha \left(\frac{\hbar\omega}{\mathcal{E}_{NL}}\right)^2.$$
 (4)

Для вычисления скорости переходов используем золотое правило Ферми. Поскольку состояние одного из конечных фотонов однозначно определяет состояние другого (в силу законов сохранения энергии и импульса), плотность конечных состояния равна плотности состояний для одного фотона. В итоге для полного сечения рассеяния фотона на фотоне получаем оценку

$$\sigma_{\gamma} \sim \alpha^{18} a_0^2 \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^6.$$
 (5)

★ При точном расчете (H. Euler, 1936) в выражение для сечения входит числовая константа #=0.062. На стандартной частоте сечение рассеяния фотона на фотоне имеет величину $\sigma_{\gamma} = 1.45 \cdot 10^{-65}$ см². При пересечении двух предельно сфокусированных (объем фокальной области $V \approx \lambda^3$) импульсов фемтосекундных ($\tau \approx 10^{-14}$ с) лазеров с интенсивностью $I \approx 10^{18}$ Вт см⁻² вероятность рассеяния пары фотонов за один импульс $W \sim 10^{-28}$.

★ Можно подумать, что рождение пар нейтрино – антинейтрино и их последующая аннигиляция дадут существенный вклад в рассеяние света на свете (так как масса нейтрино очень мала или равна нулю). Однако это не так: процесс $\gamma\gamma \rightarrow v\overline{v}$ сильно запрещен; для квантов стандартной частоты сечение имеет величину $\sigma = 2.74 \cdot 10^{-103} \ cm^2$ [DR93].

[DR93] D.A. Dicus and W.W. Repko
 Photon neutrino scattering
 Phys. Rev. D, 1993, vol. 48, no. 11, pp. 5106 – 5108.

§ 30.2 Рассеяние света на электроне

◆ До сих пор задача о квантовом описании процесса рассеяния света на свободном электроне оставалась за пределами возможностей наших методов (например, квазиэнергетическая ВФ электрона в однородном переменном поле, найденная в §20.4, приводила к нулевому сечению рассеяния в противоречии как с классической теорией [ЛЛП, §72], так и с экспериментом). Рассмотрим эту задачу с использованием квантовой модели поля. Начальное и конечное состояния электрона будем описывать плоскими волнами:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp i \frac{\vec{p}_1 \vec{r}}{\hbar}, \qquad \psi_k = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp i \frac{\vec{p}_2 \vec{r}}{\hbar}. \tag{4}$$

Оператор взаимодействия возьмем в *pA*-калибровке. Удобно проводить рассмотрение в системе координат, в которой в начальный момент электрон покоится: $\vec{p}_1 = 0$. В этой системе матричные элементы оператора \hat{V}_1 обратятся в ноль, и процесс будет определяться матричным элементом оператора

$$\hat{V}_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\vec{A}}^2$$
(5)

Матричный элемент перехода из состояния с одним фотоном в моде $(\vec{k_1}, \vec{e_1})$ в состояние с одним фотоном в моде $(\vec{k_2}, \vec{e_2})$ есть

$$V_{kn} = \frac{e^2 u^2}{mc^2 \sqrt{\omega_1 \omega_2}} \left(\vec{e}_1 \vec{e}_2 \right) \int_{L^3} \frac{1}{L^3} \exp i \left(\vec{k}_1 - \frac{\vec{p}_2}{\hbar} - \vec{k}_2 \right) \vec{r} d\vec{r} .$$
 (6)

Это выражение отлично от нуля только при выполнении закона сохранения импульса: $\hbar \vec{k_1} + \vec{p_1} (= 0) = \hbar \vec{k_2} + \vec{p_2}$. При выполнении такого равенства матричный элемент принимает вид

$$V_{kn} = \frac{2\pi\hbar e^2}{m\sqrt{\omega_1\omega_2}} (\vec{e}_1 \vec{e}_2) \frac{1}{L^3}.$$
 (7)

В силу закона сохранения импульса конечное состояние системы полностью определяется заданием моды (\vec{k}_2, \vec{e}_2) конечного фотона. Поскольку переданная электрону при рассеянии энергия,

$$\Delta E \sim \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 \frac{1}{2m},\tag{8}$$

$$d\sigma(\vec{k}_2) = \alpha^4 a_0^2 \left(\vec{e}_1 \vec{e}_2\right)^2 d\Omega \quad , \tag{9}$$

совпадающее с классическим (томсоновским) выражением. Квантовые поправки к этому выражению имеют порядок $\sim \hbar \omega / mc^2$ и уменьшают сечение.

§ 30.3 Давление света на электрон

• Квантовая теория дает легкий способ расчета силы светового давления на свободный электрон. При упругом рассеянии фотона на угол θ электрону передается импульс

$$\Delta p_x = \frac{\hbar\omega}{c} (1 - \cos\theta) \tag{10}$$

Отсюда средняя сила светового давления

$$\vec{f}_{rp} = r_0^2 \frac{I}{\hbar\omega} \vec{n} \cdot \frac{\hbar\omega}{c} \int (1 - \cos\theta) \cos^2\theta d\Omega = \vec{n} \frac{4\pi}{3} r_0^2 \frac{I}{c}$$
(11)

★ В стандартных условиях $f_s = 1.1 \cdot 10^{-20}$ дин, что соответствует ускорению электрона $a_s = 1.2 \cdot 10^7$ см с⁻². За время действия лазерного импульса $\tau_s = 10^{-8}$ с электрон приобретет среднюю скорость $V_s = 0.12$ см с⁻¹.

☆ Задача. Какую скорость приобретет электрон в результате рассеяния одного фотона? Сравнить и согласовать с приведенным выше значением.

• Формула (11) не содержит постоянной Планка и потому может быть получена и в классической теории. В поле плоской электромагнитной волны ($\vec{E} = E_z \sin(kx - \omega t)$, $\vec{H} = H_y \sin(kx - \omega t)$, $\vec{S} = S_x$) в дипольном приближении на частицу в направлении распространения волны действует компонента силы Лоренца

$$f_L = \frac{ev}{c} H_y = \frac{e^2}{m\omega c} E_z H_y \sin 2\omega t, \qquad (12)$$

среднее значение которой равно нулю. Для того, чтобы поток энергии между частями системы (полем и зарядом) был однонаправленным, нужно учесть диссипацию - *радиационное трение* [ЛЛII, §75]. Уравнение движения для x - компоненты координаты примет вид

$$m\ddot{x} + \frac{2e^2\omega^2}{3c^3}\dot{x} = e\mathcal{E}\sin\omega t, \qquad (13)$$

откуда находится величина сдвига фаз между колебаниями координаты (и скорости) электрона и колебаниями электрического поля:

$$\varphi_r \sim \frac{e^2 \omega}{mc^3} \approx 1.6 \cdot 10^{-8}.$$
 (14)

Отсюда получается оценка силы светового давления:

$$f_{rp} \sim f_L \varphi_r \sim \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{I}{c} \approx \sigma_T \frac{I}{c}.$$
 (15)

В классической электродинамике сила радиационного давления появляется как среднее значение силы Лоренца в направлении распространении волны, найденное с учетом сдвига фаз из-за радиационного трения. Выражение для силы радиационного давления совпадает с результатом квантовой теории.

★ Максимальная величина сечения рассеяния света на атоме $\sigma_+ \sim \lambda^2$, где λ - длина волны света (§ 12.1). В стандартных условиях эта величина на 18 порядков больше сечения рассеяния света на свободном электроне. Простейшая оценка для резонансного рассеяния света на атоме дает $v_s \sim 100c$, что явно указывает на возможность ускорения до релятивистских скоростей. Почему в действительности это не происходит?

§ 30.4 Рассеяние света на атоме

☆ Задача. Оценить отношение нерезонансных сечений рамановского ($\omega_2 \neq \omega_1$) и рэлеевского ($\omega_2 = \omega_1$) рассеяния света на атоме.

• При рассмотрении процессов рассеяния света на свободном электроне в §30.2 мы пользовались pA-калибровкой поля и специальным выбором системы отсчета. При рассмотрении рассеяния света на атоме надо иметь в виду, что матричные элементы однофотонных переходов между заданными состояниями в pA - калибровке и в dE - калибровке различны: используя соотношение $p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}$, доказанное в §5.2, получаем

$$V_{mn}^{pA} = \frac{\omega_{kn}}{\omega_{\lambda}} V_{mn}^{dE} \,. \tag{16}$$

Однако при одновременном учете процессов второго порядка по одноквантовому возмущению V_1 и первого порядка по V_2 (в *pA*-калибровке) оба подхода эквивалентны, если модель атомной системы удовлетворяет правилам сумм (§ 6.1). Для модели двухуровневой системы (§ 10.1) такой эквивалентности в общем случае нет. • Будем пользоваться *dE* - калибровкой. Процесс рассеяния описывается составным матричным элементом второго порядка

$$\widetilde{V}^{(2)} = 2\pi \sqrt{\omega_1 \omega_2} \Sigma_{nk} \tag{17}$$

где

$$\Sigma_{nk} = \sum_{i} \left[\frac{\left(\vec{d}_{ki}\vec{e}_{2}\right)\left(\vec{d}_{in}\vec{e}_{1}\right)}{\omega_{in} - \omega_{1}} + \frac{\left(\vec{d}_{ki}\vec{e}_{1}\right)\left(\vec{d}_{in}\vec{e}_{2}\right)}{\omega_{ik} + \omega_{1}} \right]$$
(18)

Плотность конечных состояний должна быть взята для одного испущенного фотона ω_2 . В итоге ЗПФ приводит к формуле для сечения рассеяния

$$d\sigma = \frac{\omega_1 \omega_2^3}{\hbar^2 c^4} |\Sigma_{nk}|^2 d\Omega_2$$
(19)

Зависимость от векторов поляризации падающего и рассеянного фотонов удобно выделить, введя тензор рассеяния $\hat{\chi}_{kn}$:

$$d\sigma = \frac{\omega_1 \omega_2^3}{c^4} \left| \left(\chi_{kn} \right)_{\alpha\beta} e_{2\alpha} e_{1\beta} \right|^2 d\Omega_2, \qquad (20)$$

$$\left(\hat{\chi}_{kn}\right)_{\alpha\beta} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{i} \left[\frac{\left(r_{\alpha}\right)_{ki} \left(r_{\beta}\right)_{in}}{\omega_{in} - \omega_1} + \frac{\left(r_{\beta}\right)_{ki} \left(r_{\alpha}\right)_{in}}{\omega_{ik} + \omega_1} \right]$$
(21)

Для рэлеевского рассеяния (k = n) он совпадает с тензором рассеяния, найденным в полуклассической теории (§5.1).

★ Почему полуклассическая и квантовая модели поля, приводя к одинаковым результатам для упругого рассеяния, дают качественно различные результаты для рассеяния неупругого (в полуклассической теории спектр излучения в низшем порядке содержит только частоту внешнего поля)?

Изложим еще один подход к теории рассеяния. Мы можем описывать поле падающей на систему волны классической моделью, а поле, излучаемое системой - квантовой. В первом порядке теории возмущений по внешнему полю амплитуда вероятности возбужденного состояния (§6.1)

$$a_{i}(t) = -\frac{\left(\vec{d}\vec{e}_{1}\right)_{in}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{in}+\omega_{1})t}}{\omega_{in}+\omega_{1}} + \frac{e^{i(\omega_{in}-\omega_{1})t}}{\omega_{in}-\omega_{1}}\right].$$
(22)

Рассматривая спонтанные переходы из возмущенного внешним полем состояния атома под действием однофотонного оператора излучения

$$\hat{V}^{+} = -i\frac{u}{c}\hat{\vec{d}}\sum_{\lambda}\vec{e}_{\lambda}\sqrt{\omega_{\lambda}}\hat{a}_{\lambda}^{+}e^{i\omega_{\lambda}t},$$
(23)

(см. §24.2) и учитывая, что частота испущенного фотона ω_2 должна быть положительна, для сечения рассеяния получаем

$$d\sigma = \frac{\omega_1 \omega_2^3}{\hbar^2 c^4} \left| \widetilde{\Sigma}_{nk} \right|^2 d\Omega_2 \tag{24}$$

где часть матричного элемента, включающая суммирование по промежуточным состояниям, имеет вид

$$\widetilde{\Sigma}_{nk} = \sum_{i} \left[\frac{\left(\vec{d}_{ki} \vec{e}_2 \right) \left(\vec{d}_{in} \vec{e}_1 \right)}{\omega_{in} - \omega_1} \right]$$
(25)

Это выражение отличается от формулы (20), но имеет близкие значения, если в скобках в (20) доминирует первое слагаемое. Таким образом, с оговорками процесс рассеяния можно интерпретировать как процесс спонтанного излучения из состояний, возмущенных внешним полем.

★ На основании "принципа соответствия" можно ожидать, что полностью квантовый и полуклассический по падающему полю подходы должны давать одинаковые результаты для случая достаточно сильной внешней волны. Каким образом восстанавливается такая эквивалентность?

§ 30.5 Нелинейное рассеяние на свободном электроне

• Рассмотрим процесс нелинейного рассеяния фотонов на электроне, при котором из монохроматической волны с интенсивностью I поглощаются два кванта частоты ω и испускается (спонтанно) один квант частоты 2 ω . Как и в § 30.2, рассмотрим рассеяние на покоящемся электроне. Тогда процесс будет описываться составным матричным элементом вида

$$\widetilde{V}^{(2)} = \frac{e^3}{2m^2c^3} \langle k | \vec{p}\vec{A} | i \rangle \frac{1}{\hbar\omega} \langle i | \vec{A}^2 | n \rangle.$$
(26)

По порядку величины

$$\tilde{V}^{(2)} \approx \frac{e^{3}\hbar^{3/2}}{m^{2}c^{3}\omega^{3/2}} n_{\lambda}, \qquad (27)$$

где $n_{\lambda} = I/c\hbar\omega$ - концентрация фотонов. Из золотого правила Ферми получаем оценку сечения

$$\sigma \sim \frac{e^6}{m^4 c^7 \omega^2} I.$$
 (28)

Это выражение не содержит постоянной Планка и потому может быть получено из классической теории. Движение электрона в поле электро-магнитной волны в низшем приближении можно представить как гармо-

нические колебания вдоль вектора электрического поля с законом движения

$$z = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \cos\omega t \tag{29}$$

При этом квадрупольный момент системы $D \sim er_{\alpha}r_{\beta}$ будет меняться на удвоенной частоте, приводя к излучению второй гармоники. Используя известное выражение для мощности квадрупольного излучения $P \sim c^{-5}\ddot{D}^2$ (см. §24.3) получаем для сечения то же выражение (28). К дипольному излучению на частоте второй гармоники приводит учет магнитного поля (см. формулу (12)); оно имеет тот же порядок величины.

★ Сечение (28) можно записать в виде $\sigma \sim r_0^2 (I/I_2)$, где $I_2 = m^2 c^3 \omega^2 e^{-2}$. В стандартных условиях $I_2 = 3.0 \cdot 10^{19}$ Вт см⁻², и сечение нелинейного рассеяния, определяющего скорость генерации второй гармоники на свободных электронах, на 11 порядков меньше сечения упругого рассеяния (и без того малого).

 \Rightarrow Задача. Вычислить амплитуду колебаний скорости электрона V_f в поле волны с интенсивностью I_2 .

§ 30.6 Электрон в поле стоячей волны

• Рассмотрим в рамках классической модели движение электрона в поле стоячей световой волны. Зададим поле векторным потенциалом

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{n}_y \frac{c\mathcal{E}}{\omega} \cos kx \cos \omega t \,. \tag{30}$$

Гамильтониан задачи (ср. §2.2) имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \vec{n}_y \frac{e\mathcal{E}}{\omega} \cos kx \cos \omega t \right)^2.$$
(31)

Поскольку гамильтониан содержит только координату x, компоненты импульса p_y и p_z являются интегралами движения. Положим $p_y = p_z = 0$. Тогда приходим к гамильтониану одномерного движения

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \cos^2 kx \cos^2 \omega t .$$
 (32)

Средний по времени потенциал

$$U(x) = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4m\omega^2} \cos^2 kx \tag{33}$$

может также рассматриваться как средняя локальная кинетическая энергия электрона, [ЛЛІ, §30]. Узлы электрического поля являются устойчивыми состояния равновесия для медленных движений электрона, частота малых колебаний вокруг которых

$$\Omega = \frac{e\mathcal{E}}{mc}.$$
(34)

(электрический аналог циклотронной частоты).

★ В стандартных условиях эта частота $\Omega = 1.6 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ мала в сравнении с частотой поля, что оправдывает использование метода усреднения.

☆ Задача. Оценить величину борновского параметра для потенциала (33) в стандартных условиях.

EOL 💽

КОНЕЦ ЛЕКЦИЙ ОСЕННЕГО СЕМЕСТРА