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 [ЛЛII, §68] выражение для полной мощности излучения в дипольном приближении

$$\mathsf{P} = \frac{2}{3c^3} \ddot{\vec{d}}^2 \qquad (1)$$

получаем (усреднив по времени при переходе к последнему равенству)

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

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

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

или, используя шаблон оценок (1.11),

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \alpha^4 \eta^4 a_0^2 . \qquad (4)$$

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 [ЛЛII, §78]

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

(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 $\left|\vec{k}\right| = \omega/c$, 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

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

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

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

Обобщенный импульс частицы

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

Функция Гамильтона определяется выражением

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

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

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

Для гамильтониана невозмущенной системы,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + e\Phi(\vec{r}), \tag{12}$$

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

$$r \sim \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_a} \cdot \frac{\omega_a}{\omega} = \xi\eta^{-1}. \qquad (14)$$

В стандартном случае это отношение мало: $r_s = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Заметим, что нетрудно обеспечить выполнение условия $r \geq 1$ как за счет увеличения амплитуды поля $\mathcal{E}$, 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 [ЛЛI, §2]. Заменим функцию Лагранжа (8) на

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

Тогда соответствующий гамильтониан будет иметь вид

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

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. [Б84, RZ04]).

🕮 [Б84] 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: $\vec{A}(t) \to \vec{A}(\vec{r},t)$. Уточнение оператора dE-формы приводит к мультипольному разложению (ср. [ЛЛIII, §§42,45]):

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

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

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = 9.27 \cdot 10^{-21} \text{ эрг Гаусс}^{-1} \tag{19}$$

есть *магнетон Бора.*

§ 2.3 Нестационарная теория возмущений

◆ Эволюция атомной системы S описывается нестационарным уравнением Шредингера (УШ)

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

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:

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

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

☆ 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:

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

где матричные элементы возмущения суть

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

а частоты переходов

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

③ - 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

$$a_k(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_{kn}(t')e^{i\omega_{kn}t'}dt'. \tag{26}$$

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

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

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 $f(t)$,

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

получаем

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

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

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

(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 фурье-интегралом) 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.

① Начальные условия заданы при $t_0 = -\infty$, амплитуда поля бесконечно медленно увеличивается (*адиабатическое включение* поля):

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

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

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

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

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

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

$$W_\sigma = \frac{|V_{kn}|^2}{4\hbar^2}\left[\begin{array}{l}\dfrac{1-2\sigma\cos\Sigma t+\sigma^2}{\Sigma^2}+\dfrac{1-2\sigma\cos\Delta t+\sigma^2}{\Delta^2}+ \\ +2\dfrac{\cos 2\omega t-\sigma(\cos\Sigma t+\cos\Delta t)+\sigma^2}{\Sigma\Delta}\end{array}\right], \tag{34}$$

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

$$\overline{W_0} = \frac{|V_{kn}|^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{\omega_{kn}^2+\omega^2}{\left(\omega_{kn}^2-\omega^2\right)^2}, \qquad \overline{W_1} = \frac{|V_{kn}|^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{3\omega_{kn}^2+\omega^2}{\left(\omega_{kn}^2-\omega^2\right)^2}. \tag{35}$$

Если $\Delta << \omega$, 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:

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

где фаза φ - случайная величина, равномерно распределенная на интервале $[0,2\pi]$. 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*

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

Индексы у Ω_{kn} далее часто будем опускать. Если $\hat{V}(t) = -\hat{\vec{d}}\vec{E}\cos\omega t$, 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 $\Sigma W_{nk} << 1$ и, в частности, для любого k $W_{nk} \ll 1$. Последнее условие будет выполнено при любых t, если выполнено неравенство

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

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 $\Delta \to 0$ - 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

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

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

☆ 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 ☯