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

§ 6.1 Высокочастотное разложение линейной поляризуемости (продолжение)

◆ Продолжим преобразование высокочастотного разложения линейной поляризуемости

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

где

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

с помощью соотношения

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

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

$$\begin{aligned} A_m &= \frac{e^2}{\hbar}\sum_k\left\{\left(x_{nk}\omega_{nk}^m\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^{m+1}\right)(-1)^m - \left(x_{nk}\omega_{nk}^{m+1}\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^m\right)(-1)^m\right\} = \\ &= \frac{e^2}{\hbar}\sum_k\left\{\begin{aligned}&\left(x_{nk}\omega_{nk}^m i^m\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^{m+1}i^{m+1}\right)(-1)^m(i)^{-2m-1} - \\ &\left(x_{nk}\omega_{nk}^{m+1}i^{m+1}\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^m i^m\right)(-1)^m(i)^{-2m-1}\end{aligned}\right\} \\ &= -i\frac{e^2}{\hbar}\langle n|\left[\frac{d^m\hat{x}}{dt^m}, \frac{d^{m+1}\hat{x}}{dt^{m+1}}\right]|n\rangle. \end{aligned} \qquad (1)$$

> 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

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}). \qquad (2)$$

Найдем коэффициент A_0. 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

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

Значение A_0 универсально - не зависит от вида потенциала $U(\hat{\vec{r}})$. 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.

☆ 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

$$A_1 = -i\frac{e^2}{m^2\hbar}\langle n|\left[\hat{p}_x, \frac{\partial U(\hat{\vec{r}})}{\partial x}\right]|n\rangle = -\frac{e^2}{m^2}\left\langle\frac{\partial^2 U(\hat{\vec{r}})}{\partial x^2}\right\rangle. \tag{7}$$

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

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

☆ Вычислить коэффициент A_2.

☆ 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

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

Например,

$$B_1 = \sum_k |x_{nk}|^2 \omega_{kn}^2 = \frac{1}{m^2}\langle n|p_x^2|n\rangle \qquad (9)$$

☆ 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

$$"\hbar" = \frac{\hbar}{\sqrt{mU_0a^2}}. \qquad (10)$$

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:

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

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 $\overline{E} = (E_n + E_{n+p})/2$,

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

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

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

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 $\hbar$, исходя из правила квантования Бора - Зоммерфельда:

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

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 $\hbar$ приведена в [М75, с.134].

🕮 [М75] - Мигдал А.Б.
Качественные методы в квантовой теории.
М.: Наука, 1975. - 335 с.

Подставим выражения (12) и (13) в формулу

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

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:

$$\boxed{\chi_c(\omega) = e^2 \sum_p \Omega \frac{d}{dE}\left(\frac{p^2 X_p^2 \Omega}{p^2\Omega^2 - \omega^2}\right)}\ . \tag{15}$$

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 $\hbar$ в выражении еще не делает его правильной классической формулой. К счастью, классический расчет поляризуемости одномерной нелинейной системы [ГПЮ67] приводит именно к выражению (15) (см. курс "Теория колебаний II", L10).

🕮 [ГПЮ67] - 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.X, №9-10, с.1414-53

☆ 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 $f(t) = f_0 \exp(-i\omega t)$ [ЛЛV, §123]. Поэтому вместо ранее применявшегося выражения $d(t) = \chi(\omega)\mathcal{E}\cos\omega t$ следует записать

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

Для комплексной поляризуемости выполняются соотношения симметрии

$$\chi'(\omega) = \chi'(-\omega), \quad \chi''(-\omega) = -\chi''(\omega). \qquad (17)$$

В соответствии с ними можно записать (14) в виде

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

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:

$$\begin{aligned} Q &= \overline{\dot{d}(t)\mathcal{E}\cos\omega t} = \\ &= -\overline{\omega\chi'\mathcal{E}^2\sin\omega t\,\cos\omega t} + \overline{\omega\chi''\mathcal{E}^2\cos\omega t\,\cos\omega t} \end{aligned} \qquad (19)$$

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

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

★ 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

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

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

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

(ср. [ЛЛV, (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:

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

◆ 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

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

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

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

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

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

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

◆ Оценка в буквах:

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

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 ☯