

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi \quad (1)$$

существует (.) полная система решений $\psi_n(\vec{r}, t)$, представляющих собой произведения периодических по времени с периодом T функций, $\varphi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}, t + T)$, на экспоненты с мнимыми показателями, линейно зависящими от времени:

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}, t) \exp\left(-i \frac{\tilde{E}_n}{\hbar} t\right). \quad (2)$$

Такие состояния называются *квазиэнергетическими* (КЭС), а величина \tilde{E}_n , входящая в показатель экспоненты, называется *квазиэнергией*.

★ Отметим аналогию между приведенным утверждением и *теоремой Блоха* [ЛЛХ, §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 [375]. В настоящее время КЭС чаще называются *одетыми состояниями* (dressed states); изредка для них используется термин «состояния Флоке».



[375] 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

$$\Psi^{(1)} = e^{-i\omega_n t} \varphi_n - \sum_k \frac{V_{kn}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t}}{\omega_{kn} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t}}{\omega_{kn} + \omega} \right] e^{-i\omega_k t} \varphi_k. \quad (3)$$

Его можно представить в виде ВФ квазиэнергетического состояния:

$$\Psi^{(1)} = e^{-i\omega_n t} \left\{ \varphi_n - \sum_k \frac{V_{kn}}{2\hbar} \left[\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{kn} - \omega} + \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{kn} + \omega} \right] \varphi_k \right\}. \quad (4)$$

При этом квазиэнергия этого КЭС совпадает с энергией начального состояния:

$$\tilde{E}_n = E_n. \quad (5)$$

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

$$a(t) = a_1 e^{irt} + a_2 e^{ist}, \quad (6)$$

где $\Delta = \omega_{21} - \omega$ - расстройка и введены обозначения

$$r = \frac{\Delta - \Omega_+}{2}, \quad s = \frac{\Delta + \Omega_+}{2}. \quad (7)$$

Подставив это решение в первое уравнение системы (10.4),

$$i \frac{da}{dt} = b \frac{\Omega}{2} e^{-i\Delta t}, \quad (8) \equiv (10.4)$$

найдем общее решение для амплитуды $b(t)$:

$$b(t) = a_1 \frac{2r}{\Omega} e^{ist} + a_2 \frac{2s}{\Omega} e^{irt}. \quad (9)$$

Теперь общий вид ВФ может быть записан в виде

$$\Psi(t) = \alpha_1 e^{-i(\omega_1+r)t} \left(\varphi_1 + \frac{2r}{\Omega} \varphi_2 e^{-i\omega t} \right) + \alpha_2 e^{-i(\omega_2-r)t} \left(-\frac{2r}{\Omega} \varphi_1 e^{i\omega t} + \varphi_2 \right), \quad (10)$$

где

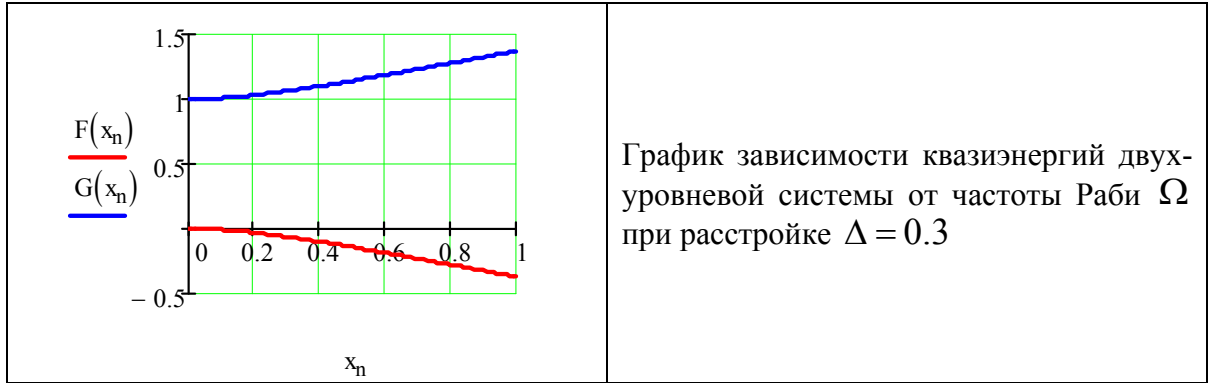
$$\alpha_1 = a_1, \quad \alpha_2 = -a_2 \frac{2r}{\Omega}. \quad (11)$$

Итак, общее решение уравнений движения для вектора состояния двухуровневой системы в приближении вращающегося поля может быть представлено как суперпозиция двух квазиэнергетических состояний

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= e^{-i(\omega_1+r)t} \left(\varphi_1 + \frac{2r}{\Omega} \varphi_2 e^{-i\omega t} \right), \\ \Phi_2 &= e^{-i(\omega_2-r)t} \left(-\frac{2r}{\Omega} \varphi_1 e^{i\omega t} + \varphi_2 \right)\end{aligned}\quad (12)$$

с квазиэнергиями

$$\tilde{E}_1 = E_1 - \hbar \left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} - \Delta}{2} \right), \quad \tilde{E}_2 = E_2 + \hbar \left(\frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} - \Delta}{2} \right) \quad (13)$$



Коэффициенты в Φ_1 и Φ_2 выбраны так, чтобы при уменьшении амплитуды поля, $\Omega \rightarrow 0$, 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

$$k\omega \pm \frac{1}{\hbar} (\tilde{E}_i - \tilde{E}_j). \quad (14)$$

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,

$$\Psi = ae^{-i\omega_1 t} \varphi_1(\vec{r}) + be^{-i\omega_2 t} \varphi_2(\vec{r}), \quad (15)$$

то и в отсутствие внешнего поля система будет обладать переменным дипольным моментом

$$\vec{d}(t) = \vec{d}_1 \left(a^* b e^{-i\omega_{21} t} + ab^* e^{i\omega_{21} t} \right) \quad (16)$$

Это выражение соответствует излучению на частоте перехода ω_{21} с мощностью

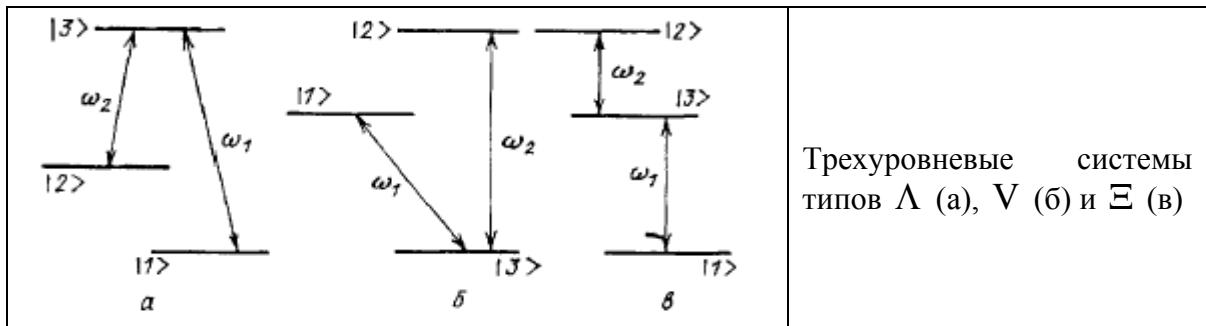
$$\mathbf{P}_s \approx \frac{4}{3} \omega_{21}^4 \frac{\vec{d}^2}{c^3} |a|^2 |b|^2 \quad (17)$$

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,

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_1 \cos \omega_1 t + \vec{E}_2 \cos \omega_2 t, \quad (18)$$

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

$$\begin{aligned} \dot{a}_1 &= i\Omega_1 e^{i\Delta_{31}t} a_3 \\ \dot{a}_2 &= i\Omega_2 e^{i\Delta_{32}t} a_3 \\ \dot{a}_3 &= i\Omega_1 e^{-i\Delta_{31}t} a_1 + i\Omega_2 e^{-i\Delta_{32}t} a_2 \end{aligned} \quad (19)$$

где введены частоты Раби для разрешенных переходов

$$\Omega_1 = \frac{\vec{d}_{13}\vec{E}_1}{\hbar}, \quad \Omega_2 = \frac{\vec{d}_{23}\vec{E}_2}{\hbar} \quad (20)$$

(оператор взаимодействия $V = -\vec{d}\vec{E}(t)$) и расстройки

$$\Delta_{31} = \omega_1 - \omega_{31}, \quad \Delta_{32} = \omega_2 - \omega_{32}. \quad (21)$$

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,

$$\Delta_{31} = \Delta_{32} = \Delta, \quad (22)$$

то экспоненты в первом и втором уравнениях (19) совпадают, и система имеет очевидный интеграл движения:

$$J = \Omega_2 a_1 - \Omega_1 a_2. \quad (23)$$

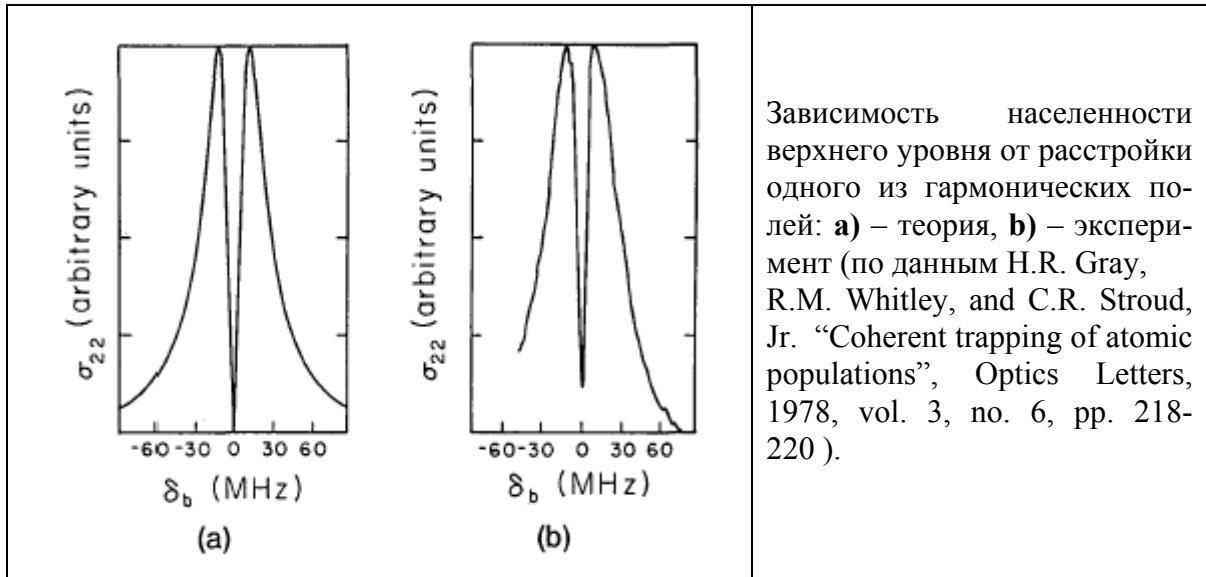
Наличие этого интеграла можно интерпретировать так: при условии (22) существует такая линейная комбинация нижних состояний

$$\Psi_d = \frac{1}{\sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}} (\Omega_2 |1\rangle - \Omega_1 |2\rangle), \quad (24)$$

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 [AO76]



[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.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

◆ *Гармоническим осциллятором* (ГО) называется система с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}. \quad (25)$$

Для квантовой модели удобно использовать осцилляторную систему единиц $m, \omega_0, \hbar \equiv 1$. В теории этой модели важную роль играют операторы

ры рождения и уничтожения, связанные с операторами координаты и импульса соотношениями

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}). \quad (26)$$

имеющие коммутационное соотношение

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (27)$$

и матричные элементы в базисе стационарных состояний

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (28)$$

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} - f\hat{x} \cos\omega t, \quad (29)$$

где

$$f = \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{\hbar m \omega_0^3}} \quad (30)$$

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:

$$\hat{H} = \hat{a}^+ \hat{a} - \frac{f}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ + \hat{a}) \cos\omega t. \quad (31)$$

Гейзенберговское уравнение движения для оператора уничтожения $\hat{a}(t)$ имеет вид

$$i \frac{d\hat{a}}{dt} = \hat{a} - \frac{f}{\sqrt{2}} \cos\omega t \quad (32)$$

Решение этого уравнения с начальным условием $\hat{a}(0) = \hat{a}_0$ есть

$$\hat{a}(t) = [\hat{a}_0 + \delta(t)] e^{-it}, \quad (33)$$

где $\delta(t)$ есть числовая функция времени

$$\delta(t) = i \frac{f}{\sqrt{2}} \int_0^t e^{it'} \cos \omega t' dt'. \quad (34)$$

В нерезонансном случае ($\omega \neq 1$) элементарное интегрирование дает ответ:

$$\hat{a}(t) = \hat{a}_0 e^{-it} + \frac{f}{2\sqrt{2}} \left[\frac{e^{i\omega t} - e^{-it}}{1 + \omega} + \frac{e^{-i\omega t} - e^{-it}}{1 - \omega} \right]. \quad (35)$$

Выражение для $\hat{a}^+(t)$ получается эрмитовым сопряжением. Для гейзенберговского оператора координаты $\hat{x}(t)$ получаем

$$\hat{x}(t) = \hat{x}_0 \cos t + \hat{p}_0 \sin t + \frac{f}{1 - \omega^2} (\cos \omega t - \cos t). \quad (36)$$

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:

$$d(t) = \frac{ef}{1 - \omega^2} \cos \omega t = \frac{e^2 \mathcal{E}}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t. \quad (37)$$

Если поле включается адиабатически, то весь отклик описывается этим выражением для $d(t)$. Выражение для линейной поляризуемости гармонического осциллятора,

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (38)$$

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 [Н53].

📖 [Н53] Kôdi Husimi
Miscellanea in Elementary Quantum Mechanics, II
Prog. Theor. Phys., 1953, vol. 9, no. 4, pp. 381-402

Нестационарное уравнение Шредингера для гармонического осциллятора (в осцилляторной системе единиц) имеет вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left[\frac{x^2}{2} - f(t)x \right] \psi. \quad (39)$$

Будем искать его решение в виде

$$\psi(x, t) = \varphi(y, t) \exp i(\dot{\eta}y + \sigma), \quad (40)$$

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 $\varphi(y, t)$:

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{y^2}{2} \varphi + y \varphi (\ddot{\eta} + \eta - f(t)) + \varphi \left(\dot{\sigma} - \frac{1}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{1}{2} \eta^2 - f(t)\eta \right). \quad (41)$$

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 :

$$\ddot{\eta} + \eta = f(t), \quad (42)$$

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{1}{2} \eta^2 + f(t)\eta \quad (43)$$

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),

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{1}{2} \eta^2 + f(t)\eta = T - U = L(\eta, \dot{\eta}, t), \quad (44)$$

есть *функция Лагранжа* для возмущенного ГО. Таким образом, величина $\sigma(t)$ есть (гамильтоново) действие [ЛЛП, §2]:

$$\sigma(t) = \int_0^t L(t') dt' = S(t). \quad (45)$$

Теперь решение Хусими для начальных условий $\psi(x,0) = \varphi_n(x)$ может быть записано в виде

$$\psi(x,t) = \varphi_n(x - \eta) \exp i \left[- \left(n + \frac{1}{2} \right) t + \dot{\eta}(x - \eta) + \int_0^t L(t') dt' \right]. \quad (46)$$

По определению КЭС (§12.1), их волновые функции имеют форму

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}, t) \exp \left(-i \frac{\tilde{E}_n}{\hbar} t \right). \quad (47)$$

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 \tilde{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 $T = 2\pi/\omega_0$.