ЛЕКЦИЯ #02
ГАМИЛЬТОНИАН
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 1

§ 2.0 Разминка

✧ **P01** Взаимодействие удаленных атомов часто может быть описано потенциалом сил Ван-дер-Ваальса

$$U(r) = -Wr^{-6}.$$

Оценить (параметрически и численно) константу W.

✧ **P02** Оценить по размерности (параметрически и численно) энергию связи основного состояния системы двух нейтронов, считая их точечными частицами с магнитным моментом $\mu_n = 5.05 \cdot 10^{-24}$ СГС.

§ 2.1 Гамильтониан

◆ Будем описывать систему S в одночастичном приближении, решая задачу о движении электрона в заданном электромагнитном поле. Статическое поле ядра или атомного остова задается скалярным потенциалом $\Phi_0(\vec{r})$. Поле действующего на систему излучения F_1 будем задавать векторным потенциалом $\vec{A}(\vec{r},t)$,

$$\vec{A}(\vec{r},t) = A\vec{e}\sin\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right), \tag{1}$$

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

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{H} = \mathrm{rot}\vec{A}. \tag{2}$$

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\Phi_0(\vec{r}) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \tag{3}$$

Для гамильтониана невозмущенной системы,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + e\Phi_0(\vec{r}), \tag{4}$$

дискретный энергетический спектр $E_n \equiv \hbar\omega_n$ и ВФ стационарных состояний $\varphi_n(\vec{r})$ будут считаться известными. Оператор

$$\hat{V}(t) = -\frac{e}{mc}\hat{\vec{p}}\vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 \qquad (5)$$

будем называть *возмущением*. Такой вид оператора возмущения будем называть pA-формой. Он удобен, если область пространственной локализации атомной системы велика - например, система находится в состоянии непрерывного спектра.

★ Оценить отношение r второго и первого членов в операторе возмущения (5) для атомной системы и стандартного лазерного импульса. **Ответ**.

$$r \sim \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_a}\cdot\frac{\omega_a}{\omega} = \xi\eta^{-1}. \qquad (6)$$

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. ■

◆ Если размеры атомной системы малы в сравнении с длиной волны излучения, и поле электромагнитной волны может быть описано как однородное переменное электрическое поле, $\vec{E}(\vec{r},t) \approx \vec{E}\cos\omega t$, то оператор возмущения может быть взят в виде

$$\hat{V}(t) = -\hat{\vec{d}}\vec{E}(t), \qquad (7)$$

где $\hat{\vec{d}} = e\hat{\vec{r}}$ есть оператор *дипольного момента*. Такой вид оператора возмущения будем называть dE-формой. Обсуждение выбора формы гамильтониана можно найти в статье [Б84].

[Б84] - Быков В.П. УФН, 1984, т. 143, вып. 4, сс. 657-682.

§ 2.2 Нестационарная теория возмущений

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

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right]\Psi. \qquad (8)$$

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:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_m a_m(t)\varphi_m(\vec{r})e^{-i\omega_m t}; \qquad (9)$$

☆ Для упрощения записи в разложении (9) игнорируются вклады от состояний непрерывного спектра. Малостью какого параметра можно оправдать такое упрощение?

☆ Какие еще базисы могут представлять интерес для построения решений нестационарной задачи?

☆ Принято выделять в членах разложения (9) 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:

$$i\hbar\frac{da_k}{dt}=\sum_m a_m V_{km}(t)e^{i\omega_{km}t}, \qquad (10)$$

где матричные элементы возмущения суть

$$V_{km}(t)=\int \varphi_k^*(\vec{r})\hat{V}(\vec{r},t)\varphi_m(\vec{r})d\vec{r}, \qquad (11)$$

а частоты переходов

$$\omega_{km}=\omega_k-\omega_m=\hbar^{-1}(E_k-E_m). \qquad (12)$$

③ - решение системы уравнений для амплитуд итерациями - обычно с начальными условиями

$$a_k(t_0)=\delta_{kn}, \qquad (13)$$

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 (13)?

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

◆ **Первый порядок НТВ**. При подстановке (13) в правую часть системы (10) последняя распадается на независимые уравнения, которые элементарно интегрируются и дают в первом порядке

$$a_k(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_{kn}(t')e^{i\omega_{kn}t'}dt'. \qquad (14)$$

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

$$W_{nk}=|a_k(t)|^2=\hbar^{-2}\left|\int_{t_0}^{t}V_{kn}(t')e^{i\omega_{kn}t'}dt'\right|^2. \qquad (15)$$

§ 2.3 Гармоническое поле: первый порядок

◆ При рассмотрении взаимодействия атомной системы с гармоническим полем - см. формулы (1), (5) и (7) - принято выделять два случая.

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

$$\hat{V}_0 = \lim_{\varepsilon\to 0} \hat{V}\cos\omega t\, e^{\varepsilon t}. \tag{16}$$

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

$$\hat{V}_1 = 0 \quad (t<0), \quad \hat{V}_1 = \hat{V}\cos\omega t \quad (t>0). \tag{17}$$

При вычислении интеграла в (14) оба случая можно рассматривать одновременно:

$$a_k(t) = -\frac{V_{kn}}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}-\sigma}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}-\sigma}{\omega_{kn}-\omega}\right] \tag{18}$$

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 (18), которое порождается компонентой **отрицательной** частоты в функции $\cos\omega t$. При квантовом описании поля (см. L~24) такие компоненты соответствуют **поглощению** кванта (фотона).

◆ Вероятности переходов даются для обоих типов включения поля громоздким выражением

$$W_\sigma = \frac{|V_{kn}|^2}{4\hbar^2}\left[\begin{array}{l}\dfrac{1-2\sigma\cos\Sigma t+\sigma^2}{\Sigma^2} + \dfrac{1-2\sigma\cos\Delta t+\sigma^2}{\Delta^2} + \\ +2\dfrac{\cos 2\omega t - \sigma(\cos\Sigma t+\cos\Delta t)+\sigma^2}{\Sigma\Delta}\end{array}\right], \tag{19}$$

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:

$$\overline{W_0} = \frac{|V_{kn}|^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{\omega_{kn}^2+\omega^2}{\left(\omega_{kn}^2-\omega^2\right)^2}, \qquad \overline{W_1} = \frac{|V_{kn}|^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{3\omega_{kn}^2+\omega^2}{\left(\omega_{kn}^2-\omega^2\right)^2}. \tag{20}$$

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:

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

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

◆ Формула (18) вводит масштаб обратного времени - *частоту Раби*

$$\Omega_{kn} = \frac{V_{kn}}{\hbar}. \tag{21}$$

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 $\Omega_s = 2.4\cdot 10^{12}\ \text{с}^{-1} = 1.3\cdot 10^{-3}\omega_s$

◆ 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 $W_{nk} << 1$. Последнее условие будет выполнено при любых t, если выполнено неравенство

$$\beta = \frac{\Omega_{nk}}{\Delta_{nk}} << 1. \tag{22}$$

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 (22) будет нарушено при $\Delta \to 0$ - в *резонансном случае*.

★ Неравенство (22) является необходимым, но недостаточным условием эффективности применения теории возмущений: малые разности частот в знаменателях выражений для амплитуд могут возникнуть при вычислении членов высших порядков.

EOL ☯