ЛЕКЦИЯ #04
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ
ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ - 2

§ 4.0 Разминка

✧ **P05** Нарисовать график зависимости сечения фотоионизации системы с единственным связанным состоянием (с энергией связи $\hbar\omega_I$) от частоты электромагнитного поля.

✧ **P06** Оценить (параметрически и численно) максимальное сечение фоторасщепления дейтрона (энергия связи $|E_0| = 2.2$ Мэв).

✧ **P07** В области частот несколько выше порога ионизации сечение рассеяния имеет порядок величины $\sigma_s \sim \alpha^4 a_0^2$, а сечение ионизации $\sigma_i \sim \alpha a_0^2$. Оценить (параметрически) отношение действительной (χ') и мнимой (χ'') частей поляризуемости атома в этой области частот.

§ 4.1 Квазинепрерывный спектр

◆ Для описания систем с дискретным спектром E_n в области высоковозбужденных состояний $(n >> 1)$ вводится функция $\mathcal{N}(E)$, равная числу уровней дискретного спектра с энергией, меньшей E. Эта функция разрывна - имеет ступенчатый вид. Пусть $\overline{\mathcal{N}}(E)$ - некоторая гладкая функция такая, что $\left|\overline{\mathcal{N}}(E) - \mathcal{N}(E)\right| < 1$. Тогда величина

$$\rho(E) = \frac{d\overline{\mathcal{N}}(E)}{dE} \qquad (1)$$

называется *плотностью* (энергетических) *уровней*.

★ Для вычисления сглаженной функции числа уровней $\overline{\mathcal{N}}(E)$ часто используется квазиклассическое приближение [ЛЛIII, §48]. - *формула Вейля*:

$$\overline{\mathcal{N}}(E) = \frac{\mathrm{V}(E)}{(2\pi\hbar)^d} \qquad (2)$$

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

◆ Если средний спектральный интервал между уровнями дискретного спектра $\Delta\omega = (\hbar\rho(E))^{-1}$ мал по сравнению со всеми существенными масштабами с той же размерностью, то дискретный энергетический спектр называется *квазинепрерывным*. Важным примером систем, для которых энергетический спектр в экспериментально реализуемых условиях часто оказывается квазинепрерывным, служат многоатомные молекулы в заданном электронном состоянии. Для N-атомной 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 (2) значение $\mathrm{V}(E)$ равно объему $2K$-мерной сферы радиуса $\sqrt{2E/\omega_v}$:

$$\mathrm{V}(E) = \frac{(2\pi)^K}{K!}\left(\frac{E}{\omega_v}\right)^K. \tag{3}$$

Отсюда для плотности уровней имеем

$$\rho(E) = \frac{1}{E}\left(\frac{E}{\hbar\omega_v}\right)^K \cdot \frac{1}{(K-1)!}. \tag{4}$$

Типичные значения колебательных частот молекул лежат в диапазоне от $2\cdot 10^{13}\,\text{с}^{-1}$ до $2\cdot 10^{14}\,\text{с}^{-1}$. Для дальнейших оценок примем $\omega_v = 6.3\cdot 10^{13}\,\text{с}^{-1}$. Рассмотрим систему в состоянии с энергией $E = \hbar\omega_s = 1.16$ эВ (примерно вдвое меньшей энергии диссоциации). Эффективное колебательное квантовое число $n_v = E/\hbar\omega_v = 28$. Тогда из (4) получаются следующие значения спектрального расстояния $\delta = \left(\hbar\rho(E)\right)^{-1}$ между соседними уровнями

Таблица 1

N	δ, с^{-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 $N \geq 5$ спектральное расстояние δ между соседними уровнями многоатомной молекулы оказывается меньше, чем ширина спектральной линии стандартного лазера, $\Delta\omega \sim 10^8\,\text{с}^{-1}$.

§ 4.2 Переходы в квазинепрерывный спектр

◆ Рассмотрим переход из начального состояния $|n\rangle$ под действием гармонического поля $\hat{V}(t) = 2\hat{V}\cos\omega t$ в резонансные состояния квазинепрерывного спектра. Сохраняя в уравнениях для амплитуд (2.10) только резонансные члены (так называемое *приближение вращающегося поля* - rotating wave approximation, RWA), получим следующую систему уравнений:

$$
\begin{aligned}
i\frac{da_k}{dt} &= a_n \Omega_{kn} e^{i\Delta_k t}, \\
i\frac{da_n}{dt} &= \sum_k a_k \Omega_{nk} e^{-i\Delta_k t},
\end{aligned}
\tag{5}
$$

где $\Delta_k = \omega_{kn} - \omega << \omega$. Будем искать решение этой системы с начальными условиями

$$a_n(0) = 1, \quad a_k(0) = 0. \tag{6}$$

Сделаем замену переменных

$$b_k = a_k e^{-i\Delta_k t}. \tag{7}$$

Добавленный нами фазовый множитель не скажется на значении населенностей: $w_k = |a_k|^2 = |b_k|^2$. Подстановка (7) в (5) приводит систему к виду

$$
\begin{aligned}
i\frac{db_k}{dt} - \Delta_k b_k &= a_n \Omega_{kn}, \\
i\frac{da_n}{dt} &= \sum_k b_k \Omega_{nk}.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Полученная система является **автономной**, что упрощает ее решение.

◆ Перейдем к фурье-представлению для динамических переменных по формуле

$$f(\tilde{\omega}) = \int_0^\infty f(t) \exp(i\tilde{\omega}t) dt. \tag{9}$$

Для обеспечения сходимости интеграла положим, что частота $\tilde{\omega}$ имеет бесконечно малую положительную добавку: $\tilde{\omega} + i0$. После преобразования Фурье системы (8) с учетом начальных условий (6) уравнения приобретают вид:

$$
\begin{aligned}
(\tilde{\omega} - \Delta_k) b_k &= a_n \Omega_{kn}, \\
-i + \tilde{\omega} a_n &= \sum_k \Omega_{nk} b_k,
\end{aligned}
\tag{10}
$$

откуда

$$a_n(\tilde{\omega}) = \left[-i\tilde{\omega} - i \sum_k \frac{\Omega_{nk}^2}{\tilde{\omega} - \Delta_k} \right]^{-1}. \tag{11}$$

Допустим, что в резонанс попадает много уровней:

$$\boxed{N_r \approx \Omega \hbar \rho >> 1} \tag{12}$$

Условие (12) называется условием образования *квазиконтинуума*. Если зависимость частот Раби от расстройки $\Omega_{nk} = \Omega(\Delta_k)$ может быть описана гладкой функцией $\Omega(\Delta)$, то суммирование по k в (11) можно заменить интегрированием:

$$\sum_k \cdot \to \int \cdot \rho(\Delta)\hbar d\Delta, \tag{13}$$

где введено обозначение $\rho(\Delta) \equiv \rho(E_k + \hbar\Delta)$. В итоге фурье-амплитуда исходного состояния принимает вид

$$a_n(\tilde{\omega}) = \left[-i\tilde{\omega} - iJ(\tilde{\omega})\right]^{-1}, \tag{14}$$

где

$$J(\tilde{\omega}) = \int \frac{\Omega^2(\Delta)\hbar\rho(\Delta)}{\tilde{\omega} + i0 - \Delta} d\Delta. \tag{15}$$

Для определения асимптотического поведения $a_n(t)$ при $t \to \infty$ существенно поведение $a_n(\tilde{\omega})$ при малых частотах $\tilde{\omega}$. В первом приближении можно заменить $J(\tilde{\omega})$ на $J(0)$:

$$\begin{aligned} J(0) &= -i\pi\Omega^2(0)\hbar\rho(0) - \mathcal{P}\int \frac{\Omega^2(\Delta)\hbar\rho(\Delta)}{\Delta} d\Delta = \\ &= -i\gamma - \sigma. \end{aligned} \tag{16}$$

Здесь $\mathcal{P}\int$ есть символ главного значения интеграла.

◆ Величина σ описывает сдвиг резонансной частоты внешним переменным полем (динамический эффект Штарка); он мал и нас пока интересовать не будет. Пренебрегая σ, получаем

$$a_n(\tilde{\omega}) = \left[-i\tilde{\omega} + \gamma\right]^{-1}. \tag{17}$$

Это выражение представляет фурье-образ экспоненты: на больших временах населенность начального состояния убывает по экспоненциальному закону, $w_n = \left|a_n(t)\right|^2 = \exp(-2\gamma t)$. Из сравнения с формулой (3.13) видно, что **постоянная** скорость перехода в резонансные состояния есть

$$\boxed{\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{nk}\right|^2 \rho(E_k),} \tag{18}$$

где V_{nk} - матричный элемент перехода на ближайший к резонансу уровень. Соотношение (18) также называется *золотым правилом Ферми* (ЗПФ); мы будем ссылаться на него как на GR_2.

★ Формальное сходство (GR_1) и (GR_2) не должно вводить в заблуждение: величины матричных элементов V_{nk} и плотности конечных состояний $\rho(E_k)$ в них имеют **разные размерности**.

◆ Рассмотрим конечное распределение населенностей уровней вблизи резонанса. Подстановка (17) в первое из уравнений системы (10) дает

$$b_k(\tilde{\omega}) = \frac{\Omega_{nk}}{(\gamma - i\tilde{\omega})(\tilde{\omega} - \Delta_k)}. \tag{19}$$

Асимптотика больших t функции $b_k(t)$ определяется вторым (ближайшим к действительной оси) полюсом выражения для $b_k(\tilde{\omega})$:

$$b_k(t) \approx \frac{\Omega_{nk}}{(\gamma - i\Delta_k)} e^{-i\Delta_k t}. \tag{20}$$

Распределение населенностей резонансных уровней при $t \to \infty$ описывается лоренцевой формой,

$$w(\Delta) \approx \frac{\Omega^2}{\Delta^2 + \gamma^2}, \tag{21}$$

со спектральной шириной $\gamma = \pi\Omega^2\hbar\rho$. Полоса спектра такой ширины содержит

$$\boxed{N_p \approx \Omega^2\hbar\rho \cdot \hbar\rho \approx N_r^2} \tag{22}$$

уровней. Таким образом, при условии возникновения квазиконтинуума ($N_r >> 1$) число эффективно заселяемых уровней дискретного спектра $N_p \approx N_r^2$ оказывается **много больше**, чем число уровней N_r, для которых выполнено условие резонанса с гармоническим полем. Объяснение эффекта состоит в уширении резонанса при изменяющейся со временем амплитуде начального состояния $a_n(t)$.

☆ Оценить величину поправки к скорости перехода в квазиконтинуум $\dot{W}$, связанную с зависимостью населенности начального состояния от времени.

★ Выше остались неосвещенными три вопроса: параметрическая оценка динамического штарковского сдвига σ и численные оценки условия возникновения квазиконтинуума и величины скорости переходов $\dot{W}$ для модели многоатомной молекулы. Все эти вопросы связаны с получением оценок для V_{nk} (или, что то же, для Ω_{nk}). Мы вернемся к их обсуждению позже.

EOL ☯