ЛЕКЦИЯ #05
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ
ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ - 3
ЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ

§ 5.0 Разминка

✧ **P08** Оценить плотность состояний $\rho(E)$ (в эВ$^{-1}$) системы двух электронов, заключенных в куб с ребром $L = 2\cdot 10^{-7}$ см, в области энергий $E \approx \hbar\omega_s$.

✧ **P09** Для переходов в высоковозбужденные $(n >> 1)$ состояния атома водорода оценить (параметрически и численно) напряженность поля $\mathcal{E}_{qc}$, соответствующую возникновению квазиконтинуума.

§ 5.1 Переходы в шумовом поле

◆ До сих пор мы пользовались моделью монохроматического внешнего поля, $\hat{V}(t) = \hat{V}\cos\omega t$. В ряде случаев необходим учет флуктуаций внешнего поля излучения, делающих его спектр непрерывным. Обычной моделью шумового поля служит *стационарный случайный процесс* [АДЧ81, с.38]. Запишем возмущение в виде $\hat{V}(t) = \hat{V}\xi(t)$, где безразмерная случайная функция $\xi(t)$ нормирована условием $\langle \xi^2(t)\rangle = 1$; предположим также, что $\langle \xi(t)\rangle = 0$. Здесь и в дальнейшем угловые скобки означают усреднение по реализациям. Скорость перехода в данной реализации дается выражением

$$\dot{W}_{nk} = \frac{|V_{nk}|^2}{\hbar^2}\left[\xi(t)e^{i\omega_{kn}t}\int_{-\infty}^{t}\xi^*(t')e^{-i\omega_{kn}t'}dt' + \text{к.с.}\right]. \quad (1)$$

Усредняя это выражение по реализациям с использованием определения корреляционной функции,

$$B(\tau) = \langle \xi(t)\xi^*(t-\tau)\rangle, \quad (2)$$

получаем

$$\langle \dot{W}_{nk}\rangle = \frac{|V_{nk}|^2}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}B(\tau)e^{i\omega_{kn}\tau}\,d\tau. \quad (3)$$

Используя связь между корреляционной функцией и спектральной плотностью (*теорема Винера - Хинчина*, [АДЧ81, с.44]),

$$B(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty}S(\omega)\,e^{i\omega\tau}\,d\omega, \quad (4)$$

представим ответ в виде

$$\boxed{\left\langle \dot{W}_{nk} \right\rangle = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| V_{nk} \right|^2 S(-\omega_{kn})} \tag{5}$$

Соотношение (5) также называется *золотым правилом Ферми* (ЗПФ); мы будем ссылаться на него как на GR_3.

★ **Примером** стационарного шумового поля является тепловое излучение внешнего источника. Форма спектра теплового излучения в модели абсолютно черного тела описывается функцией

$$S_T(\omega) = \frac{15}{2\pi^4} \cdot \frac{\omega^3}{\omega_T^4} \left(e^{\omega/\omega_T} - 1 \right)^{-1}, \tag{6}$$

где $\omega_T = kT/\hbar$, а T есть температура источника. Солнечному свету соответствуют интенсивность $I_\circ = 0.135$ Вт см$^{-2}$ и характерная частота $\omega_{T\circ} = 7.3 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$, что дает значения матричного элемента $V_{nk} = ea_0 \sqrt{8\pi I_\circ / c} = 8.53 \cdot 10^{-20}$ эрг и спектральной плотности на стандартной частоте $S_{T\circ}(\omega_s) = 1.47 \cdot 10^{-16}$ с. В итоге для средней скорости перехода имеем оценку $\left\langle \dot{W} \right\rangle = 6.1$ с$^{-1}$.

◆ Формулы (GR_1) и (GR_3) служат источником еще одной формы выражения для скорости перехода,

$$\boxed{\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{nk} \right|^2 \delta(E_n + \hbar\omega - E_k),} \tag{7}$$

которую также принято называть золотым правилом Ферми. Правая часть выражения (7) равна либо нулю, либо бесконечности, и не может быть непосредственно соотнесена с результатами измерений. Однако при умножении (7) на плотность состояний (или плотность уровней) $\rho(E)$ и интегрировании по dE из нее получаются формулы (GR_1) и (GR_2), а при умножении (7) на спектральную плотность шумового излучения $S(\omega)$ и интегрировании по $d\omega$ из нее получается формула (GR_3).

§ 5.2 Линейная поляризуемость

◆ По определению, средний дипольный момент $< \hat{\vec{d}}(t) > \equiv \vec{d}(t)$ (для удобства письма опускаем угловые скобки и знак оператора) квантовой системы в состоянии $\left| \Psi \right\rangle$ есть

$$\vec{d}(t) = \left\langle \Psi(t) \right| e\hat{\vec{r}} \left| \Psi(t) \right\rangle. \tag{8}$$

Далее будем называть $\vec{d}(t)$ просто *дипольным моментом*. Рассмотрим поведение дипольного момента системы с дискретным спектром, находящейся под действием адиабатически включаемого гармонического возмущения

$\hat{V}_0(t) = -e\vec{r}\vec{E}\cos\omega t$. Если $|n\rangle$ - начальное (невозмущенное) стационарное состояние системы, то в первом порядке теории возмущений дипольный момент дается выражением (9)

$$\vec{d}(t) = \int\left(\varphi_n^*(\vec{r})e^{i\omega_n t} + \sum_k a_k^*(t)\varphi_k^*(\vec{r})e^{i\omega_k t}\right)(e\vec{r})\left(\varphi_n(\vec{r})e^{-i\omega_n t} + \sum_k a_k(t)\varphi_k(\vec{r})e^{-i\omega_k t}\right)d\vec{r}$$

где амплитуды $a_k(t)$ определяются формулой первого порядка теории возмущений. Будем считать, что состояния $|n\rangle$ и $|k\rangle$ дискретного спектра обладают определенной **четностью**. Тогда

$$\vec{d}(t) = \sum_k\left[\vec{d}_{nk}e^{i\omega_{nk}t}a_k(t) + \vec{d}_{kn}e^{i\omega_{kn}t}a_k^*(t)\right]. \qquad (10)$$

Подставляя в это выражение значения амплитуд (см. формулу 2.18),

$$a_k(t) = -\frac{V_{kn}}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\omega_{kn}-\omega}\right], \qquad (11)$$

приходим к формуле

$$\vec{d}(t) = \cos\omega t\sum_k\left[\frac{\vec{d}_{nk}V_{kn}}{\hbar}\left(\frac{1}{\omega_{nk}+\omega} + \frac{1}{\omega_{nk}-\omega}\right)\right]. \qquad (12)$$

> В первом порядке теории возмущений дипольный момент системы пропорционален величине возмущения и зависит от времени гармонически, с частотой поля.

◆ Определим *тензор линейной поляризуемости* системы S соотношением $d_\alpha = \chi_{\alpha\beta}\mathcal{E}_\beta$ (подразумевается суммирование по повторяющимся индексам). Из вида оператора возмущения $\hat{V}_0(t) = -e\vec{r}\vec{E}\cos\omega t$ и формулы (12) получается выражение

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar}\sum_k\frac{2\omega_{kn}(r_\alpha)_{nk}(r_\beta)_{kn}}{\omega_{kn}^2-\omega^2} \qquad (13)$$

В дальнейшем, когда речь пойдет об оценках, мы будем называть поляризуемостью и отдельную компоненту тензора, положив условно $\chi = \chi_{xx}$. Итак,

$$\boxed{\chi(\omega) = \frac{e^2}{\hbar}\sum_k\frac{2\omega_{kn}x_{nk}^2}{\omega_{kn}^2-\omega^2}} \qquad (14)$$

Вблизи резонансов линейная поляризуемость неограниченно возрастает. Это возрастание имеет **фантомный** характер, поскольку предпосылкой вывода формулы (14) является применимость первого порядка теории возмущений для расчета амплитуд.

◆ Оценим величину поляризуемости вдали от резонансов, на низких частотах: $\chi(\omega) \approx \chi(0)$.

① Стандартная оценка. Для атома в основном состоянии можно принять $x_{nk} \sim a_0$, $\omega_{nk} \sim \omega_a$ и $\chi(0) \sim e^2 a_0^2 / \hbar\omega_a \sim a_0^3$, что согласуется с предварительной оценкой в примере 1 §1.3.

② Квазивырождение сильно увеличивает восприимчивость. Если по каким-либо причинам в спектре имеется уровень, близкий к начальному, $\omega_{nk} << \omega_a$, то может оказаться, что $\chi(0) >> a_0^3$ (много больше геометрической оценки).

★ **Пример**. Из-за взаимодействия атома с вакуумом электромагнитного поля уровни дискретного спектра сдвигаются по отношению к положениям, найденным в модели атома, описываемой уравнением Дирака (*лэмбовский сдвиг*). Лэмбовский сдвиг приводит к расщеплению уровней $2p_{1/2}$ и $2s_{1/2}$ у атома водорода: частота перехода между ними $\omega_{2sp} \approx 6.6 \cdot 10^9$ с$^{-1} \approx 0.41\alpha^3\omega_a$. Статическая поляризуемость атома в состоянии $2s_{1/2}$ имеет величину порядка $\chi(0) \sim 10^7 a_0^3$.

☆ Может ли статическая поляризуемость атома $\chi(0)$ быть отрицательной?

③ Квазиклассическая область. Оценим статическую поляризуемость атома в ридберговском состоянии с квантовым числом $n >> 1$. В области больших n $x_{nk} \sim a_0 n^2$, $\omega_{nk} \sim \omega_a n^{-3}$. Типичное слагаемое в сумме в формуле (14) растет как n^7. Слагаемые, соответствующие состояниям $k = n + p$ и $k = n - p$, дают в сумму вклады близкой величины, но разного знака. Поэтому

$$\chi(0) \sim \frac{d}{dn} a_0^3 n^7 \sim a_0^3 n^6, \qquad (15)$$

что в общем согласуется с наивной геометрической оценкой §1.3 (пример 1).

◆ Наряду с поляризуемостью в теоретической физике рассматривают [ЛЛV, §123] (обобщенную) *восприимчивость* $\alpha(\omega)$, определенную соотношением $\alpha(\omega) = e^{-2}\chi(\omega)$ и представляющую коэффициент пропорциональности между фурье-компонентами смещения и силы. Размерность восприимчивости $[\alpha] = \mathrm{M}^{-1}\mathrm{T}^2$.

EOL ☯