ЛЕКЦИЯ #06
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ
ЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ - 2

§ 6.0 Разминка

✧ **P10** Оценить поляризуемость протона на частоте ω_s.

✧ **P11** Нарисовать графики зависимостей поляризуемости χ от частоты ω для следующих одномерных моделей:

a) гармонического осциллятора,

b) частицы в потенциальном ящике $(U(x)=0\ (x<a),\quad U(x)=\infty\ (x>a))$,

находящихся в состояниях с главным квантовым числом $n=2$.

§ 6.1 Высокочастотное разложение

◆ В области высоких частот, $\omega\to\infty$, выражение для поляризуемости

$$\boxed{\chi(\omega)=\frac{e^2}{\hbar}\sum_k\frac{2\omega_{kn}x_{nk}^2}{\omega_{kn}^2-\omega^2}}\tag{1}$$

можно представить в виде формального разложения по степеням ω^{-2}:

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

где

$$A_m=\frac{e^2}{\hbar}\sum_k 2x_{nk}^2\omega_{kn}^{2m+1}.\tag{3}$$

Коэффициенты A_m могут быть записаны в форме средних значений некоторых операторов по начальному состоянию $|n\rangle$. Это позволяет приближенно вычислять поляризуемость $\chi(\omega)$ **без** предварительного определения всех частот переходов ω_{kn} и матричных элементов x_{kn}.

◆ Основой преобразований является связь между матричными элементами (**произвольного**) оператора $\hat{Z}$ и его производной по времени $\dot{\hat{Z}}$ между стационарными состояниями системы с гамильтонианом $\hat{H}$. Из уравнения Гейзенберга

$$\dot{\hat{Z}}=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{Z},\hat{H}\right]\tag{4}$$

получаем

$$\left(\dot{Z}\right)_{nk}=i\omega_{nk}Z_{nk}.\tag{5}$$

◆ Отметим полезный частный случай этого соотношения. Для систем с гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}) \tag{6}$$

для оператора координаты $\hat{x}$ получаем

$$\dot{\hat{x}} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{x}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right] = \frac{\hat{p}}{m}, \tag{7}$$

откуда получается соотношение между матричными элементами операторов координаты и соответствующей компоненты импульса:

$$\boxed{p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}.} \tag{8}$$

◆ Вернемся к высокочастотному разложению для поляризуемости. Используя очевидное соотношение $\omega_{nk} = -\omega_{kn}$, коэффициенты разложения можем записать в виде

$$\begin{aligned} A_m &= \frac{e^2}{\hbar}\sum_k \left\{ \left(x_{nk}\omega_{nk}^m\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^{m+1}\right) - \left(x_{nk}\omega_{nk}^{m+1}\right)\left(x_{kn}\omega_{kn}^m\right) \right\} = \\ &= -i\frac{e^2}{\hbar}\langle n|\left[\frac{d^m\hat{x}}{dt^m}, \frac{d^{m+1}\hat{x}}{dt^{m+1}}\right]|n\rangle. \end{aligned} \tag{9}$$

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

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}). \tag{10}$$

Найдем коэффициент A_0. Из гейзенберговского уравнения движения (8) получаем

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}, \tag{11}$$

(что согласуется с классическим определением импульса), и

$$A_0 = -i\frac{e^2}{\hbar m}\langle n|\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right]|n\rangle = -\frac{e^2}{m}. \tag{12}$$

Значение A_0 универсально - не зависит от вида потенциала $U(\hat{\vec{r}})$. Главный член в высокочастотной асимптотике поляризуемости любых систем одинаков.

★ Безразмерная величина $f^x_{kn} = 2m\hbar^{-1}x^2_{kn}\omega_{kn}$ называется *силой осциллятора* перехода $n \to k$. Равенство $A_0 = e^2 m^{-1}\sum_k f^x_{kn}$ приводит к соотношению

$$\sum_k f^x_{kn} = 1, \qquad (13)$$

которое известно как *теорема Томаса - Куна* о суммах сил осцилляторов.

☆ Может ли сила осциллятора f^x_{kn} для некоторого перехода превосходить 1?

◆ Найдем коэффициент A_1. Из гейзенберговского уравнения движения (18) следует равенство

$$\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = -\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}_x}{m}, U(\hat{\vec{r}})\right] = -\frac{1}{m}\cdot\frac{\partial U(\hat{\vec{r}})}{\partial x}, \qquad (14)$$

повторяющее второй закон Ньютона. Из (19) находим

$$A_1 = -i\frac{e^2}{m^2\hbar}\langle n|\left[\hat{p}_x, \frac{\partial U(\hat{\vec{r}})}{\partial x}\right]|n\rangle = -\frac{e^2}{m^2}\left\langle\frac{\partial^2 U(\hat{\vec{r}})}{\partial x^2}\right\rangle. \qquad (15)$$

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}.

§ 6.2 Классический предел поляризуемости

◆ Коэффициенты A_0 и A_1 высокочастотного разложения поляризуемости (§6.1) 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

$$"\hbar" = \frac{\hbar}{\sqrt{mU_0a^2}}. \qquad (16)$$

Определим классический предельный переход так: $\hbar \to 0$ при условии, что начальный уровень дискретного спектра сохраняет неизменную энергию $E_n = E$. В квазиклассической области $\hbar << 1$ 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:

$$x(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} X_k(E)e^{ik\Omega(E)t}, \qquad (17)$$

где $\Omega(E)$ - частота классического движения, X_k - фурье-амплитуда k-й гармоники закона движения.

При $\hbar << 1$ частота перехода $\omega_{n+p,n}$ приближенно равна p -кратной частоте классического движения при средней энергии перехода $\overline{E} = \left(E_n + E_{n+p}\right)/2$,

$$\omega_{n+p,n} = p\Omega\left(\overline{E}\right) = p\Omega + \hbar\frac{p^2}{2}\Omega\frac{d\Omega}{dE}. \qquad (18)$$

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

$$x_{n,n+p} = X_p\left(\overline{E}\right) = X_p + \hbar\frac{p}{2}\Omega\frac{dX_p}{dE}. \qquad (19)$$

Формулы (18) и (19) составляют утверждения основных **теорем соответствия** квантовой механики (их также называют *принципом соответствия*). Они могут быть обоснованы с помощью метода ВКБ.

☆ Доказать равенство (18) в **нулевом** прядке по $\hbar$, исходя из правила квантования Бора - Зоммерфельда:

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[E_n - U(x)\right]}\,dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad (20)$$

где x_1, x_2 - точки поворота (корни уравнения $E = U(x)$).

☆ Используя результат предыдущей задачи, доказать равенство (18) 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 (19) в **нулевом** порядке по $\hbar$ приведена в [M75, с.134].

🕮 [M75] - Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. - М.: Наука, 1975. - 335 с.

Подставим выражения (18) и (19) в формулу (1) 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:

$$\boxed{\chi_c(\omega) = e^2 \sum_p \Omega \frac{d}{dE}\left(\frac{p^2 X_p^2 \Omega}{p^2\Omega^2 - \omega^2} \right) .} \qquad (21)$$

★ 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 (21) (см. курс "Теория колебаний II", L10).

[ГПЮ67] - Гапонов А.В., Петелин М.И., Юлпатов В.К. 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**.

EOL ☯