ЛЕКЦИЯ #07
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ
ЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ - 2

§ 7.0 Разминка

✧ **Р12** Оценить (параметрически и численно) максимальную мощность $\mathbf{P}_+$ рассеянного излучения в пределах применимости формулы для $\chi(\omega)$.

✧ **Р13** Для системы, связанной потенциалом нулевого радиуса (и имеющей единственное связанное состояние) зависимость сечения однофотонной ионизации от частоты имеет вид

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{(\omega - 1)^{3/2}}{\omega^3}$$

(где частота ω - в единицах пороговой частоты ионизации, $\omega > 1$). Нарисовать график зависимости поляризуемости этой системы χ (в основном состоянии) от частоты ω.

✧ **Р14** Нарисовать график зависимости классической поляризуемости χ слабо нелинейного одномерного осциллятора в состоянии с собственной частотой колебаний Ω от частоты ω внешнего поля.

§ 7.1 Мнимая часть поляризуемости и изменение энергии

◆ При рассмотрении поляризуемости $\chi(\omega)$ как комплексной величины необходимо учесть, что в общей теории комплексная восприимчивость $\alpha(\omega)$ определяется по отклику на силу вида $f(t) = f_0 \exp(-i\omega t)$ [ЛЛV, §123]. Поэтому вместо ранее применявшегося выражения $d(t) = \chi(\omega)\mathcal{E}\cos\omega t$ следует записать

$$d(t) = \frac{1}{2}\left[\chi(\omega)\mathcal{E}e^{-i\omega t} + \chi(-\omega)\mathcal{E}e^{i\omega t}\right]. \tag{1}$$

Для комплексной поляризуемости выполняются соотношения симметрии

$$\chi'(\omega) = \chi'(-\omega), \quad \chi''(-\omega) = -\chi''(\omega). \tag{2}$$

В модели адиабатического включения поля (см. §2.3) частота ω, входящая в $f(t)$ имеет бесконечно малую мнимую добавку. Учитывая тождество

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{x - i\varepsilon} = i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\frac{1}{x}, \tag{3}$$

для мнимой части $\chi''(\omega)$ поляризуемости системы в состоянии $|n\rangle$ получаем выражение

$$\chi''(\omega) = \pi \frac{e^2}{\hbar} \sum_k x_{nk}^2 \left[\delta(\omega_{kn} - \omega) - \delta(\omega_{kn} + \omega) \right] \tag{4}$$

(ср. [ЛЛV, (124.8)]).

◆ Из общей теории восприимчивости следует, что *средняя скорость изменения энергии* Q системы, находящейся под действием гармонического поля частоты ω, пропорциональна мнимой части поляризуемости (ср. [ЛЛV, (123.11)]):

$$\boxed{Q = \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) \mathcal{E}^2} \tag{5}$$

★ Говоря о знаке мнимой части восприимчивости, подразумевают ее знак при заданном **положительном** значении частоты. Из-за симметрии $\chi''(-\omega) = -\chi''(\omega)$ скорость изменения энергии не зависит от этой условности.

Формула (5) пригодна для расчетов, если энергия системы за счет работы, совершаемой внешним электрическим полем, изменяется со временем по **линейному** закону - если переходы из начального состояния системы происходят с **постоянной** скоростью - если эволюция системы описывается золотым правилом Ферми.

★ Поэтому формула (4) **не описывает** отклик системы с дискретным спектром на сколь угодно **слабое гармоническое** внешнее поле. Формулы (4) и (5) **позволяют** вычислить скорость поглощения энергии системой под действием сколь угодно **слабого шумового** поля с непрерывной спектральной плотностью $S(\omega)$:

$$Q = \mathcal{E}^2 \int \frac{\omega}{2} \chi''(\omega) S(\omega) \, d\omega. \tag{6}$$

§ 8.1 Поглощение при переходах в квазиконтинуум: хаотический случай

◆ Формула (5) позволяет рассчитать поляризуемость системы с квазинепрерывным спектром в условиях, когда гармоническое внешнее поле достаточно сильно, чтобы возник квазиконтинуум. Пусть $|n\rangle$ - высоковозбужденное состояние такое, что оба резонансных значения энергии $E_{k\pm} = E_n \pm \hbar\omega$ принадлежат области плотного дискретного спектра. Скорость изменения энергии системы может быть записана в виде

$$Q = \hbar\omega \left(\dot{W}_+ - \dot{W}_- \right), \tag{7}$$

где скорости переходов с увеличением $(\dot{W}_+)$ и уменьшением $(\dot{W}_-)$ энергии определяются золотым правилом Ферми (GR_2) (см. §4.2):

$$\dot{W}_\pm = \frac{2\pi}{\hbar}\cdot\frac{e^2\mathcal{E}^2}{4}\left|x_{nk}\right|^2\rho\left(E_{k\pm}\right), \tag{8}$$

где $\rho\left(E_{k\pm}\right)$ есть плотность уровней системы вблизи конечных состояний.

◆ Если классическое движение системы является **хаотическим**, то спектральная плотность $S_x(E,\omega)$ координаты x классической системы в состоянии с энергией E будет непрерывной функцией частоты ω (что на спектральном языке отражает наличие перемешивания: см. курс NLD). Квантовым аналогом этой непрерывности является отсутствие правил отбора, облегчающее возникновение квазиконтинуума. Матричные элементы x_{nk} квантовых хаотических систем нерегулярно зависят от индекса k и могут описываться как случайные величины. Входящее в формулы (8) среднее значение квадрата $\overline{\left|x_{nk}\right|^2}$ матричных элементов резонансных переходов выражается через классический спектр мощности $S_x(E,\omega)$ так [FP86, W87]:

$$\overline{\left|x_{nk}\right|^2} \approx \frac{S_x(E,\omega)}{\hbar\rho(E)} \tag{9}$$

[FP86] - Feingold M., Peres A. - Phys. Rev. A, 1986, 34, 1, 591-5.

[W87] - Wilkinson M. - J. Phys. A, 1987, 20, 9, 2415-23.

Для энергии E, входящей в (9), следует брать интерполяционное значение

$$\overline{E}_\pm = \frac{E_n \pm E_{k\pm}}{2} = E_n \pm \frac{\hbar\omega}{2} \tag{10}$$

(ср. выбор средней энергии перехода $\overline{E}$ в §7.1). Из формул (7), (8) (9) и (10) получаем:

$$Q = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2\mathcal{E}^2\left(\frac{dS_x}{dE} + S_x\frac{d\ln\rho}{dE}\right). \tag{11}$$

Отсюда с помощью формулы (5) находим мнимую часть поляризуемости:

$$\boxed{\chi''(\omega) = \frac{\pi\omega e^2}{\rho}\frac{d}{dE}(S_x\rho).} \tag{12}$$

Существенно, что найденная мнимая часть поляризуемости является классической величиной - не содержит постоянной Планка $\hbar$.

☆ Отметим, что определенная формулой (12) мнимая часть восприимчивости может на некоторых частотах принимать отрицательные значения: при определенных условиях энергия системы под действием внешнего гармонического поля может уменьшаться.

Действительная часть поляризуемости может быть найдена из (12) с помощью дисперсионного соотношения Крамерса - Кронига,

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\tilde{\omega})}{\tilde{\omega} - \omega} d\tilde{\omega}. \tag{13}$$

☆ Исследовать аналогию между формулами (6.21) и (7.12) для восприимчивостей классических систем с регулярным (периодическим) и хаотическим движениями.

◆ С помощью формулы (9) можно ответить на отложенные вопросы из §4.2. Для нелинейных осцилляторов в области сплошной стохастичности средняя частота движения и ширина спектра имеют один порядок величины; обозначим его характерной частотой Ω (см. курс NLD). Максимальная спектральная плотность координаты

$$\max S_x \sim \langle x^2 \rangle \Omega^{-1}, \tag{14}$$

где $\langle x^2 \rangle$ - средний квадрат смещения частицы от положения равновесия. Для N-атомной молекулы с энергией E величину $\langle x^2 \rangle$ можно оценить по теореме о равнораспределении энергии:

$$M \langle x^2 \rangle \Omega^2 \sim \frac{E}{K}, \tag{15}$$

где M - эффективная масса, K - число колебательных степеней свободы. Принимая, как в § 4.1, $E = 1.16$ эВ, $\Omega = \omega_v = 6.3 \cdot 10^{13}\ \text{с}^{-1}$, получаем $S_x \sim K^{-1} \cdot 1.7 \cdot 10^{-31}\ \text{см}^2\,\text{с}$. Условие возникновения квазиконтинуума дает значение порога

$$\mathcal{E}_{qc} = \frac{\hbar}{e} \sqrt{\frac{\delta}{S_x}} \approx 5.3 \cdot 10^{-3} \sqrt{\delta K}\ \text{Гс}, \tag{16}$$

где δ - спектральное расстояние между уровнями (в с^{-1}). Используя значения δ, из § 4.1, получаем для молекул с различными числами атомов N следующие значения напряженности $\mathcal{E}_{qc}$ электрического поля излучения и его интенсивности I_{qc}, соответствующие порогу возникновения квазиконтинуума:

N	$\mathcal{E}_{qc}$, Гс	I_{qc}, Вт см$^{-2}$
3	$3.7 \cdot 10^3$	$1.6 \cdot 10^9$
4	$2.7 \cdot 10^2$	$9.0 \cdot 10^6$
5	41	$2.0 \cdot 10^4$
6	10	$1.2 \cdot 10^4$

В экспериментах [ЛМ81] возбуждение молекул с $N = 4...12$ в квазиконтинуум наблюдается при интенсивностях ИК излучения $I = 10^5 ... 10^9$ Вт см$^{-2}$.

[ЛМ81] - Летохов В.С., Макаров А.А. - УФН, 1981, 134, 1, 45-91.

☆ Считая основным механизмом поглощения энергии многоатомной молекулой в поле ИК излучения резонансные переходы в квазиконтинууме, оценить пороговое для диссоциации значение плотности энергии лазерного импульса Φ,

$$\Phi = \int I(t)dt \qquad (17)$$

для рассмотренной выше модельной молекулы (энергия диссоциации $D = 2.32\,\text{эВ} = 56\hbar\omega_v$).

★ Экспериментальные данные о пороговых для диссоциации значениях плотности энергии излучения приведены в [ЛМ81, с.~77].

ДОПОЛНЕНИЕ К ЛЕКЦИИ

◆ Формула (11) позволяет определить среднюю скорость изменения энергии системы. Этой информации недостаточно для описания эволюции состояний системы. Описание этой эволюции может быть получено на основе выражения (8) с учетом (10):

$$W_\pm(E) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\cdot\frac{e^2\mathcal{E}^2}{4}\left[S \pm \frac{\hbar\omega}{2}\left(S' + S\frac{\rho'}{\rho}\right)\right], \qquad (18)$$

Будем считать энергетический спектр непрерывным. Опишем состояние системы функцией распределения по энергии $w(E,t)$. Тогда с учетом однофотонных переходов можно записать уравнение

$$\frac{dw(E)}{dt} = -w(E)\left(\dot{W}_+ + \dot{W}_-\right) + w(E+\hbar\omega)\dot{W}_+ + w(E-\hbar\omega)\dot{W}_- \qquad (19)$$

Считая функцию $w(E)$ гладкой и раскладывая ее в ряд Тейлора до квадратичных по $\hbar$ членов, из (19) получаем уравнение в частных производных, имеющее смысл уравнения ***энергетической диффузии***,

$$\boxed{\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial E}(Aw) - \frac{\partial}{\partial E}\left(D\frac{\partial w}{\partial E}\right) = 0}, \qquad (20)$$

где коэффициенты сноса A и диффузии D даются выражениями

$$A = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2\mathcal{E}^2 S\frac{\rho'}{\rho}, \qquad D = \frac{\pi}{2}\omega^2 e^2\mathcal{E}^2 S. \qquad (21)$$

Существенно, что формулы (21)- так же, как и формула (12) - не содержат постоянной Планка $\hbar$.

EOL ☯