ЛЕКЦИЯ #10
АЛЬТЕРНАТИВЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ
ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА

§ 10.0 Разминка

✧ **Р19** Найти главный член высокочастотного разложения кубической восприимчивости $\chi_3 \equiv \chi^{(3)}[3\omega]$ одночастичной системы.

✧ **Р20** Оценить (параметрически и численно) интенсивность I_{23} поля излучения стандартной частоты, $\omega = \omega_S$, при которой мощности, излучаемые свободным атомом на **удвоенной** и **утроенной** частотах действующего излучения, равны.

✧ **Р21** Для системы с единственным связанным состоянием с энергией связи E_I нарисовать график зависимости *логарифма* скорости ионизации $\dot{W}$ от частоты ω при постоянной интенсивности излучения, считая применимой теорию возмущений.

§ 10.1 Альтернативы теории возмущений

◆ Все предыдущие расчеты эволюции квантовой системы в состоянии $|n\rangle$ под действием гармонического поля $\hat{V}(t) = \hat{V}\cos\omega t$ основывались на формуле первого порядка теории возмущений для амплитуд, полученной в § 2.3:

$$a_m(t) = -\frac{V_{mn}}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\omega_{mn}+\omega}\right]. \tag{1}$$

Это выражение применимо до тех пор, пока **все** описываемые им амплитуды $a_m(t)$ малы.

◆ Такое условие заведомо не выполняется в случае *изолированного резонанса*, когда $\omega \to \omega_{mn}$ только для **одного** состояния $|m\rangle$. Изолированный резонанс возможен в любой системе с неэквидистантным спектром при сколь угодно малом возмущении. Если при этом для всех остальных состояний $|k\rangle \neq |m\rangle, |n\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_k(t)| << 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле вводится модель *двухуровневой системы*, учитывающая амплитуды только двух состояний системы $\hat{H}_0$, связанных резонансным переходом.

◆ Особый случай представляет модель *гармонического осциллятора*. В силу эквидистантности спектра для нее резонансными становятся одновременно переходы между **всеми** соседними уровнями, и двухуровневое приближение неприменимо. Эта модель должна быть рассмотрена отдельно.

◆ Рассмотрим модель ангармонического осциллятора, спектр которого имеет вид

$$E_n = \hbar\omega_v\left(n - \frac{\kappa}{2}n^2\right) \tag{2}$$

где $\kappa << 1$ - параметр нелинейности. Если система находится в состоянии $|n\rangle$ и внешнее поле находится в точном резонансе с частотой $\omega_u = \omega_{n+1,n}$ перехода в состояние $|n+1\rangle$, то амплитуда перехода в состояние $|n-1\rangle$ мала при условии малости параметра

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\kappa\omega_v}, \tag{3}$$

где Ω - частота Раби. Если $\beta_r \geq 1$, то модель двухуровневой системы теряет применимость: при этом условии возмущение находится в резонансе со многими переходами. Такую ситуацию называют *квантовым нелинейным резонансом*. Если при этом выполняется неравенство

$$\beta_+ = \frac{\Omega}{\omega} << 1, \tag{4}$$

то эффективно приближение вращающегося поля, в котором в операторе возмущения учитываются только резонансные частотные компоненты:

$$V_{mn}\cos\omega t \to \frac{1}{2}V_{mn}\exp\left[-i(\mathrm{sign}\,\omega_{mn})\omega t\right] \tag{5}$$

Так строится модель для описания квантового нелинейного резонанса в приближении вращающегося поля. Мы будем называть ее моделью *многоуровневого резонанса*.

◆ Наконец, если $\beta_+ \geq 1$, то теряет применимость приближение вращающегося поля. В этой области "нормальные" (поглощение фотона приводит к увеличению энергии системы) и "аномальные" (поглощение фотона приводит к уменьшению энергии системы) процессы одинаково эффективны. Область $\beta_+ \geq 1$ назовем областью *сильного поля*.

★ Модель ангармонического осциллятора эффективна для квазиклассических систем. Положим $\omega_v = 0.041\omega_s = 7.26\cdot 10^{13}\,\text{с}^{-1}$, $d = ea_0 = 2.54\,\text{Дб}$, $\kappa = 10^{-2}$ - параметры, типичные для двухатомных молекул. Тогда порог многоуровневого резонанса $\beta_d = 1$ достигается в резонансном поле амплитуды $\mathcal{E}_r = 300\,\text{Гс}$ с интенсивностью $I_r = 1.1\cdot 10^{7}\,\text{Вт}\,\text{см}^{-2}$, а порог сильного поля $\beta_+ = 1$ - при амплитуде $\mathcal{E}_+ = 3\cdot 10^{4}\,\text{Гс}$, что соответствует интенсивности $I_+ = 1.1\cdot 10^{11}\,\text{Вт}\,\text{см}^{-2}$. Таким образом, **все четыре случая** - пертурбативный, резонансный двухуровневый, резонансный многоуровневый и случай сильного поля - лежат в области, доступной современному эксперименту.

§ 10.2 Построение модели

◆ Если частота ω гармонического электромагнитного поля, действующего на квантовую систему, находящуюся в состоянии $|n\rangle$, близка к частоте одного из переходов ω_{mn} настолько, что найденная по теории возмущений амплитуда $a_m(t)$ не мала, и если при этом для всех остальных состояний $|k\rangle \neq |m\rangle, |n\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_k(t)| << 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле этими амплитудами можно пренебречь. Обозначим заново существенные стационарные состояния невозмущенной системы: $|n\rangle \equiv |1\rangle$ и $|m\rangle \equiv |2\rangle$. Будем предполагать, что $\omega_{21} > 0$. Состояние системы S может быть приближенно описано ВФ вида

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= A(t)\varphi_1(\vec{r}) + B(t)\varphi_2(\vec{r}) = \\ &= a(t)e^{-i\omega_1 t}\varphi_1(\vec{r}) + b(t)e^{-i\omega_2 t}\varphi_2(\vec{r}).\end{aligned} \tag{6}$$

Модель с произвольным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ и вектором состояния вида (6) называется *двухуровневой системой*. Величины A и B будем называть *быстрыми*, а a и b - *медленными амплитудами* состояний двухуровневой системы.

◆ Уравнения для медленных амплитуд $a(t)$ и $b(t)$ в гармоническом поле $\hat{V}(t) = \hat{V}\cos\omega t$ можно получить, оставив от системы (10) §2.2 только два уравнения:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{db}{dt} &= \frac{a}{2}\left[Ve^{i(\omega_{21}+\omega)t} + V^* e^{i(\omega_{21}-\omega)t}\right], \\ i\hbar\frac{da}{dt} &= \frac{b}{2}\left[Ve^{-i(\omega_{21}-\omega)t} + V^* e^{-i(\omega_{21}+\omega)t}\right].\end{aligned} \tag{7}$$

где $V = V_{12}$ - матричный элемент возмущения (в модели двухуровневой системы предполагается, что диагональные матричные элементы возмущения равны нулю: $V_{11} = V_{22} = 0$). Непосредственное решение системы уравнений (7) представляет значительные трудности. Действительно, на языке теории колебаний мы имеем дело с четырехмерной ($K = 4$) системой (a и b комплексны), находящейся под параметрическим квазипериодическим двухчастотным возмущением.

§ 10.3 Переходы в приближении вращающегося поля

◆ Упрощение системы (7) возможно, если возмущение не слишком велико - мал параметр

$$\beta_+ = \frac{V}{\hbar\omega_{21}}.$$

★ Если $\hat{V} = -\vec{d}\vec{E}(t)$ - оператор дипольного взаимодействия, а $\omega_{21} = \omega_s$, то условие $\beta_+ = 1$ выполняется при напряженности поля излучения $\mathcal{E}_+ = 7.32 \cdot 10^5$ Гс, которому соответствует интенсивность $I_+ = 6.4 \cdot 10^{13}$ Вт см$^{-2}$ $= 6.4 \cdot 10^5 I_S$.

В этом случае для описания переходов в условиях, близких к резонансу, можно использовать *приближение вращающегося поля* (см. §4.2), сохранив в уравнениях только те (резонансные) члены, в которых показатели экспонент в резонансе обратятся в ноль. Тогда система (7) примет вид

$$i\frac{da}{dt} = b\frac{\Omega}{2}e^{-i\Delta t}, \quad i\frac{db}{dt} = a\frac{\Omega^*}{2}e^{i\Delta t}, \tag{8}$$

где $\Omega = V_{12}/\hbar$ есть частота Раби. С точки зрения теории колебаний, переход к приближению вращающегося поля заменяет квазипериодическое двухчастотное воздействие на гармоническое.

☆ Доказать, что величина $J_1 = |a|^2 + |b|^2$ является интегралом движения системы (8).

Система (8) может быть сведена к уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами

$$\frac{d^2b}{dt^2} - i\Delta\frac{db}{dt} + \frac{|\Omega|^2}{4}b = 0, \tag{9}$$

общее решение которого имеет вид

$$b(t) = b_1 \exp i\left(\frac{\Delta + \Omega_+}{2}t\right) + b_2 \exp i\left(\frac{\Delta - \Omega_+}{2}t\right), \tag{10}$$

где введено обозначение

$$\Omega_+ = \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}. \tag{11}$$

Соответственно, общее решение для амплитуды $a(t)$ есть

$$a(t) = a_1 \exp -i\left(\frac{\Delta - \Omega_+}{2}t\right) + a_2 \exp -i\left(\frac{\Delta + \Omega_+}{2}t\right). \tag{12}$$

Выберем начальные условия в виде $a(0) = 1$, $b(0) = 0$. Тогда зависимость амплитуды состояния $|2\rangle$ имеет вид

$$b(t) = i\frac{|\Omega|}{\Omega_+}e^{i\frac{\Delta t}{2}}\sin\frac{\Omega_+}{2}t. \tag{13}$$

Вероятность перехода в состояние $|2\rangle$ определяется формулой

$$\boxed{W_{12} = \frac{|\Omega|^2}{\Omega_+^2}\sin^2\frac{\Omega_+}{2}t}. \tag{14}$$

В двухуровневой системе под действием гармонического поля с расстройкой $\Delta = \omega_{21} - \omega$ вероятность перехода меняется со временем по гармоническому закону с частотой $\Omega_+ = \sqrt{|\Omega|^2 + \Delta^2}$. Частота и амплитуда осцилляций вероятностей **растут** при увеличении возмущения.

☆ Проверить, переходит ли выражение (14) в результат (3), найденный в §3.1 по теории возмущений для малого интервала времени после внезапного включения резонансного поля.

☆ Исследовать при малой величине Ω/Δ поправку к частоте осцилляций амплитуды $b(t)$, отличающую результат двухуровневой модели от результата теории возмущений,

EOL ☯