ЛЕКЦИЯ #14
НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Модель двухуровневой системы (TLS), рассмотренная в лекциях L10 - 12, позволяет описать воздействие сильного поля на систему только для случая **сильного** ангармонизма. Если частота поля ω, резонансная для перехода ω_{12}, одновременно резонансна и для перехода ω_{23}, то необходимо использовать подходы, отличные от выделения TLS. Случай **нулевого** ангармонизма - гармонической осциллятор - был рассмотрен в лекции L13. Перейдем к рассмотрению модели со **слабым** ангармонизмом.

§14.1 Слабо нелинейный осциллятор

◆ Спектр слабо нелинейной системы с одной степенью свободы может быть задан в виде

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n - \frac{\kappa}{2}n^2\right), \tag{1}$$

где n - главное квантовое число (номер уровня), κ - коэффициент ангармонизма. Частоты переходов между соседними уровнями суть

$$\omega_t \approx \frac{1}{\hbar}\cdot\frac{dE}{dn} = \omega_0(1-\kappa n). \tag{2}$$

Величина ω_t неотрицательна: отсюда $\kappa \approx \mathcal{N}^{-1}$, где $\mathcal{N}$ - число состояний дискретного спектра. Для квазиклассических систем число связанных состояний пропорционально корню из борновского параметра $B = 2mU_0a^2\hbar^{-2}$: $\mathcal{N} \sim \sqrt{B}$. Для двухатомных молекул $B \approx 10^4$ и $\kappa \approx 10^{-2}$.

◆ Если частота внешнего гармонического поля ω находится в точном резонансе с переходом $n \to n+1$, $\omega = \omega_0(1-\kappa n)$, то расстройка частоты поля от резонанса с переходом $n \to n-1$ есть $\Delta = \omega_0\kappa$. При выполнении условия

$$\beta_d = \frac{\Omega}{\omega_0\kappa} \geq 1 \tag{3}$$

нельзя пренебречь переходами в состояние $|n-1\rangle$: модель двухуровневой системы теряет применимость.

§14.2 Нелинейный резонанс: классический подход

◆ Рассмотрим классическую модель нелинейного осциллятора во внешнем гармоническом поле, заданную уравнением движения [ЛЛI, §28]

$$m\ddot{x}+m\omega_0^2\left(x+\lambda x^3\right)=m\lambda^{-1/2}\omega_0^2F\cos\omega t, \tag{4}$$

часто называемую *моделью Дуффинга.* Принимая $m,\omega_0,\lambda\equiv 1$, уравнение можно переписать в форме

$$\ddot{x}+x+x^3=F\cos\omega t. \tag{5}$$

Модель определяется двумя безразмерными параметрами F и ω. Введем эффективную расстройку

$$\Delta=\frac{\omega^2-1}{2}. \tag{6}$$

При $\omega\approx 1$ $\Delta\approx\omega-1$.

◆ Если действующая на систему сила мала, $F<<1$, то периодическое с периодом внешнего поля движение системы может описываться гармоническими колебаниями, $x(t)=A\cos(\omega t+\varphi)$. Амплитуда этих колебаний A удовлетворяет уравнению [ЛЛI, §29]

$$A^2\cdot\left(\Delta-\frac{3}{8}A^2\right)^2=\frac{F^2}{4}. \tag{7}$$

При фиксированной расстройке Δ и достаточно малых F уравнение (7) имеет три положительных корня, $A_d<A_s<A_u$:

$$A_d\approx\frac{F}{2\Delta}<<\Delta<<1 \tag{8}$$

$$A_{u,s}\approx\sqrt{\frac{8}{3}\Delta}\pm\frac{F}{2\Delta} \tag{9}$$

Решения u и d устойчивы, решение s неустойчиво.

◆ Выше описан случай точного резонанса. Исследуем движение системы вблизи резонанса методом медленно меняющихся амплитуд, положив

$$x(t)=q(t)\cos\omega t+p(t)\sin\omega t. \tag{10}$$

При дополнительных предположениях $\Delta<<1$, $F<<1$ получаем уравнения движения для медленных амплитуд

$$\dot{q}=-\frac{2\Delta}{\omega}p+\frac{3}{4\omega}\left(q^2+p^2\right)p,\qquad \dot{p}=\frac{F}{\omega}+\frac{2\Delta}{\omega}q-\frac{3}{4\omega}\left(q^2+p^2\right)q. \tag{11}$$

Это - система канонических уравнений для гамильтониана

$$\Lambda(p,q)=T(p,q)+V(q), \tag{12}$$

$$T(p,q) = -\frac{\Delta}{\omega} p^2 \left[1 - \frac{3}{16\Delta} \left(2q^2 + p^2 \right) \right], \tag{13}$$

$$V(q) = -\frac{F}{\omega} q - \frac{\Delta}{\omega} q^2 + \frac{3}{16\omega} q^4. \tag{14}$$

Система может интерпретироваться как модель, описывающая движение частицы переменной (и даже **знакопеременной**!) массы в потенциальном поле $V(q)$. Потенциал $V(q)$ имеет три точки экстремума, соответствующие (в порядке возрастания q) решениям s, d и u соответственно.

☆ Линеаризовав систему (11) вблизи точек d и u, найти частоты малых колебаний системы вблизи этих положений равновесия.

§14.3 Квантовый нелинейный осциллятор в гармоническом поле: динамическое туннелирование

◆ Автономной гамильтоновой системе, введенной в §14.2 для описания движения вблизи нелинейного резонанса, может быть сопоставлена квантовая модель - заменой q и p на канонические операторы,

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{15}$$

★ Такая замена **приближенна**: из исходных динамических уравнений следует, что $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar + \hbar O\left(\Delta, q^2, p^2\right)$. В области применимости уравнений, полученных методом ММА, поправки малы.

Бистабильность системы (11) - наличие двух фазовых траекторий с одной энергией при $V(s) \le \Lambda \le V(d)$ - в квантовом случае исчезает ввиду возможности динамического туннелирования системы из одной области в другую. В квантовом случае состояние, локализованное вблизи "u", устойчиво, а состояние, локализованное вблизи "d", неустойчиво.

◆ Оценим матричный элемент перехода из состояния d в окрестность состояния u методом ВКБ. Положим

$$\psi(q) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dq \right). \tag{16}$$

В отличие от обычного УШ, из-за наличия в гамильтониане Λ членов четвертого порядка по p в задаче присутствуют две ветви квадрата импульса:

$$p_{\pm}^2 = g^{-2} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + 4g^2 (fq + \lambda)} \right\} - q^2, \tag{17}$$

где введены обозначения

$$f = \frac{F}{2\Delta}, \qquad g^2 = \frac{3\omega}{8\Delta}, \qquad \lambda = \frac{\Lambda\omega}{2\Delta}. \tag{18}$$

Точки поворота определяются соотношением $p^2(q) = 0$ и лежат на кривой $\Lambda = V(q)$, Обе ветви квадрата импульса совпадают на прямой с уравнением $1 + 4g^2(fq + \lambda) = 0$. Эта прямая касается кривой $V(q)$ в точках с абсциссами q_- и q_+. Внутри интервала (q_-, q_+) лежат точки поворота ветви p_-, а вне него - ветви p_+.

◆ С экспоненциальной точностью величина матричного элемента перехода дается выражением

$$W \sim \exp(-2S/\hbar), \tag{19}$$

где “подбарьерное действие” S определяется выражением

$$S = \int_c^a |p_-(q)| dq - \int_c^b |p_+(q)| dq. \tag{20}$$

Здесь a есть координата состояния d, b - точка поворота ветви p_+ при энергии $\Lambda = \Lambda(d)$, c - координата точки равенства импульсов на двух ветвях p_+ при энергии $\Lambda = \Lambda(d)$. Асимптотика S при $f \to 0$ имеет вид

$$S \approx g^{-2}[2 - \ln(\gamma g f)], \tag{21}$$

где $\gamma = \exp C = 1.781$ - постоянная Эйлера. В исходных переменных вероятность перехода имеет (с экспоненциальной точностью) вид

$$W \sim (\gamma g f)^{\frac{2}{\hbar g^2}} \approx \left(\frac{3\gamma\omega F}{16\Delta^2}\right)^{2\frac{8\Delta}{3\hbar\omega}}. \tag{22}$$

Она зависит от силы F, пропорциональной напряженности поля $\mathcal{E}$, степенным образом: $W \sim F^{2N}$, где величина

$$N = \frac{8\Delta}{3\hbar\omega}. \tag{23}$$

в квазиклассическом случае велика. Учитывая, что энергия состояния u, в котором частота перехода между соседними уровнями близка к частоте поля, есть $E_u \approx 8\Delta/3$, находим, что N есть номер уровня состояния u. Таким образом, квазиклассический расчет приводит к выводу о пропорциональности скорости динамического туннелирования между состоянием с малой амплитудой d и состоянием с большой амплитудой u интенсивности поля в степени, равной числу поглощаемых при переходе квантов. К такому же результату приведет и расчет по теории возмущений: скорость N-фотонного перехода пропорциональна F^{2N} (см. L10.1).

★ Обратимся к числовому примеру. Возьмем типичные для моделей молекулярных колебаний значения $m = 10^{-22}$ г, $\omega_0 = 1.3 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$ и $\kappa = 5 \cdot 10^{-3}$. При расстройке $\Delta = 0.1 << 1$ состоянию u будет соответствовать уровень с номером $N = 20 >> 1$. При малой возмущающей силе $F = 0.02 << \Delta$ численный расчет интеграла дает для величины $2S/\hbar$ значение $28.1 >> 1$. Итак, $W \approx \omega_0 \exp(-2S/\hbar) \sim 10$ с$^{-1}$. Принятое значение силы соответствует напряженности поля $\mathcal{E} \approx 2 \cdot 10^6$ Гс и его интенсивности $I \approx 5 \cdot 10^{14}$ Вт см$^{-2}$.

> Хотя в строгом смысле состояние нелинейного осциллятора d с малой амплитудой вынужденных колебаний в квантовом случае неустойчиво, но его время жизни даже в очень сильных полях на много порядков больше типичной длительность лазерного импульса.

§14.4 Квантовый нелинейный осциллятор в гармоническом поле: квазиэнергетические состояния

◆ Рассмотрим квазиэнергетические состояния нелинейного осциллятора со спектром $(\hbar \equiv 1)$

$$\varepsilon_n = \omega_0 \left(n - \frac{\kappa}{2} n^2 \right) \tag{24}$$

в гармоническом внешнем поле $\hat{V}(t) = 2\hat{V}\cos\omega t$. Подставив в нестационарное уравнение Шредингера

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + 2\hat{V}\cos\omega t \right)\Psi \tag{25}$$

разложение

$$\Psi = \sum c_n(t)\varphi_n(x)\exp(-i\varepsilon_n t), \tag{26}$$

получим систему уравнений для амплитуд $c_n(t)$, которую упростим с помощью приближения вращающегося поля (см. §3.1 и §11.2):

$$i\dot{c}_n = V c_{n+1} e^{i(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n - \omega)t} + V c_{n-1} e^{i(\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n + \omega)t}. \tag{27}$$

Положим теперь, что матричные элементы существенно отличны от нуля только для переходов между соседними уровнями, и что все такие матричные элементы равны между собой:

$$V_{n,n-1} = V_{n,n+1} = V = \mathrm{const}. \tag{28}$$

★ Такая замена эквивалентна приближению, в котором нелинейность осциллятора сказывается только на его спектре, а закон движения представляет гармонические колебания - как у линейного осциллятора.

Определим номер резонансного уровня r (не обязательно целый!) соотношением

$$\varepsilon_{r+\frac{1}{2}} - \varepsilon_{r-\frac{1}{2}} = \omega. \tag{29}$$

Тогда для r получаем уравнение

$$\omega_0(1-\kappa r) = \omega. \tag{30}$$

Положим теперь $n = r + q$: переменная q указывает номер уровня, отсчитанный от резонансного. Для величин, входящих в показатели экспонент, получаем

$$\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \omega - \omega_0\kappa q - \omega\frac{\kappa}{2}, \tag{31}$$

$$\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n = -\omega + \omega_0\kappa q - \omega\frac{\kappa}{2}. \tag{32}$$

Теперь система уравнений для амплитуд принимает вид

$$i\dot{c}_q = Vc_{q+1}e^{-i\left[\omega_0\kappa q+\omega\frac{\kappa}{2}\right]t} + Vc_{q-1}e^{i\left[\omega_0\kappa q-\omega\frac{\kappa}{2}\right]t}. \tag{33}$$

Сделаем подстановку, в результате которой во всех членах уравнения будет содержаться один и тот же экспоненциальный множитель:

$$c_q = a_q \exp\left(i\omega_0\kappa\frac{q^2}{2}t\right). \tag{34}$$

Для амплитуд a_q получим уравнение

$$i\dot{a}_q = \omega_0\kappa\frac{q^2}{2}a_q + Va_{q+1} + Va_{q-1}. \tag{35}$$

Его можно интерпретировать как уравнение для амплитуд в одномерной цепочке со взаимодействием ближайших соседей и энергией, квадратично зависящей от номера узла. Считая зависимость $a(q)$ плавной, можно континуализовать уравнение (35) (ср. НЛД, §4.1; §6.2, §12.4), считая q непрерывной переменной, разложив $a(q\pm1)$ в ряд Тейлора и ограничившись первыми тремя членами:

$$a(q\pm1) \approx a(q) \pm \frac{\partial a(q)}{\partial q} + \frac{1}{2}\cdot\frac{\partial^2 a(q)}{\partial q^2}. \tag{36}$$

В результате приходим к уравнению

$$i\dot{a}(q) = \omega_0 \kappa \frac{q^2}{2} a_q + V \frac{\partial^2 a(q)}{\partial q^2} + 2Va(q). \tag{37}$$

Это - нестационарное уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с параметрами

$$\frac{\hbar^2}{2m} = V, \qquad m\Omega^2 = \hbar\omega_0\kappa. \tag{38}$$

Собственная частота колебаний это осциллятора равна

$$\Omega = \sqrt{\frac{2V\omega_0\kappa}{\hbar}} \sim \sqrt{\Omega_R \Delta}. \tag{39}$$

◆ Стационарные состояния осциллятора (37) описывают квазиэнергетические состояния, образованные суперпозициями стационарных состояний $\varphi_n(x)$ исходного нелинейного осциллятора с номерами $n \approx r$, лежащими вблизи резонансного значения. Эти состояния называются захваченными в *квантовый нелинейный резонанс*. Они описываются функциями вида

$$a_m(q,t) = H_m(q) e^{-i\Omega\left(m+\frac{1}{2}\right)t}, \tag{40}$$

где $H_m(q)$ - известные функции Эрмита. Основное состояние осциллятора (НО) соответствует $m = 0$ и описывает квазиэнергетическое состояние с наименьшим числом уровней:

$$c_n(t) = c_r(t)(\pi\zeta)^{-1/4} \exp\left(-\frac{q^2}{2\sqrt{\zeta}}\right) \tag{41}$$

где

$$\zeta = \frac{2V}{\hbar\omega_0\kappa}. \tag{42}$$

Таким образом, минимальное число состояний, захваченных в нелинейный резонанс, есть $\delta n_- \approx \zeta^{1/4}$.

★ Сделаем числовые оценки. Для молекулярного осциллятора с $\kappa = 5 \cdot 10^{-3}$ при сдвиге частоты от частоты малых колебаний $\Delta = 0.1\omega_0$, что соответствует номеру резонансного уровня $r = 20$. Матричный элемент перехода между соседними уровнями может быть взят из модели гармонического осциллятора: $V \approx e^* a_0 \mathcal{E} \sqrt{r}$. В поле стандартной напряженности $V \approx 1.2 \cdot 10^{-15}$ эрг. При этом значение $\zeta = 4.7$, что дает число захваченных в резонанс уровней $\delta n = 1.47$. Такое значение δn слишком мало для обоснования применимости использованного приближения. Частота колебаний в нелинейном резонансе (частота перехода между соседними квазиэнергетическими состояниями) при этих условиях $\Omega = 1.07 \cdot 10^{12}$ с$^{-1}$ $<< \omega_0$.

☆ Оценить **максимальное** число состояний φ_n, захваченных в квантовый нелинейный резонанс. К решению этой задачи можно подойти двумя путями. Во-первых, можно взять за основу нарушение предположения о плавности зависимости $a(q)$, положив, что максимальному номеру квазиэнергетического состояния $\max m = M$ будет соответствовать среднее расстояние между нулями функции $H_M(q)$, равное единице - одному междууровневому интервалу. Во-вторых, можно использовать принцип соответствия, рассмотрев ширину классического нелинейного резонанса по действию (см. НЛД, §4.1) и учитывая, что в квазиклассическом пределе $I \approx n\hbar$. Одинаковые ли результаты получаются в этих двух подходах?

> В квантовом нелинейном резонансе нелинейный осциллятор обладает собственной частотой $\Omega = \sqrt{2V\omega_0\kappa\hbar^{-1}} << \omega_0$ и может резонансным образом поглощать энергию внешнего поля на этой (низкой и зависящей от напряженности внешнего поля) частоте.

EOL ☯