ЛЕКЦИЯ #18
ТЕОРИЯ РЕЛАКСАЦИИ - 4
СИЛЬНОЕ ПОЛЕ - 1

§ 18.1 Движение двухуровневой системы с релаксацией

◆ Уравнения движения для компонент вектора Блоха двухуровневой системы, взаимодействующей с гармоническим внешним полем с частотой Раби Ω и расстройкой Δ в приближении вращающегося поля и во вращающейся системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} \dot{u} + \Gamma_2 u &= -\Delta v \\ \dot{v} + \Gamma_2 v &= \Delta u + \Omega w \\ \dot{w} + \Gamma_1 (w - w_0) &= -\Omega v \end{aligned} \tag{1}$$

Эта система характеризуется четырьмя параметрами одинаковой размерности $(\Gamma_1, \Gamma_2, \Delta, \Omega)$, поэтому полное ее исследование представляет весьма трудоемкую задачу. Ограничимся простейшими и важнейшими частными случаями.

◆ По общим принципам исследования динамических систем (NLD, L01) начнем с исследования стационарных решений. Из первых двух уравнений системы получаем соотношения

$$v = \frac{\Omega\Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} w, \quad u = -\frac{\Omega\Delta}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} w. \tag{2}$$

Подстановка последнего соотношения в третье уравнение дает

$$w = \frac{\Gamma_2^2 + \Delta^2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2 + \Omega^2 \dfrac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} w_0. \tag{3}$$

☆ Найденные выражения показывают, что система (1) всегда имеет неподвижную точку - и притом только одну. Исследовать устойчивость этой точки и определить ее тип (он определяется наличием комплексных характеристических показателей и знаками их действительных частей).

Удобно ввести следующие комбинации параметров модели:

$$z = \frac{\Omega^2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2}, \qquad \xi = \frac{\Omega^2}{\Gamma_1\Gamma_2}. \tag{4}$$

Квадрат длины вектора Блоха в стационарном состоянии имеет величину

$$S^2 = w_0^2 \frac{1+z}{\left(1 + \dfrac{\Gamma_2}{\Gamma_1} z\right)^2}. \tag{5}$$

Эта величина может в общем случае отличаться от единицы.

☆ При рассмотрении эволюции вектора Блоха в заданном поле было показано, что эволюция является унитарной - длина вектора Блоха остается неизменной. Взаимодействие с термостатом есть всего лишь воздействие некоторого внешнего поля - со специфическим несимметричным частотным спектром. Как такое воздействие может нарушить унитарность, присущую исходной модели?

◆ Усреднение ансамбля векторов единичной длины, но разных направлений не может привести к появлению среднего вектора с длиной больше единичной. Величина w_0 зависит только от температуры термостата - и может быть сделана равной единице. Тогда, раскладывая S^2 по малому параметру z, получаем

$$S^2 \approx 1 + \left(1 - 2\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}\right)z + \ldots \tag{6}$$

Поскольку эта величина не должна превосходить единицы, заключаем, что во всех физически допустимых системах между константами поперечной и продольной релаксации должно выполняться соотношение

$$\Gamma_2 \geq \frac{\Gamma_1}{2}. \tag{7}$$

★ Напомним, что при построении теории взаимодействия с термостатом получалось, что вклад быстрых (резонансных) спектральных компонент $\Gamma_2' = \Gamma_1/2$, а медленные дают еще дополнительный положительный вклад, $\Gamma_2'' = A \geq 0$ (см. §17.2). В итоге неравенство $\Gamma_2 \geq \Gamma_1/2$ получалось из динамической модели. Теперь же видно, что оно появляется как условие физической осмысленности системы уравнений Блоха с константами релаксации.

◆ Рассмотрим теперь зависимость параметров состояния равновесия от расстройки Δ. Стационарные значения поперечных компонент вектора Блоха имеют вид

$$v_s = w_0 \frac{\Omega\Gamma_2}{\Gamma_2^2(1+\xi) + \Delta^2}, \qquad u_s = -w_0 \frac{\Omega\Delta}{\Gamma_2^2(1+\xi) + \Delta^2}. \tag{8}$$

Компоненты u_s и v_s определяют поляризацию во вращающейся системе координат. Возвращаясь в неподвижную систему, для компоненты вектора поляризации P получаем

$$P(t) = \frac{u + iv}{2} e^{i\omega t} + \frac{u - iv}{2} e^{-i\omega t}. \tag{9}$$

Внешнее поле имеет зависимость от времени

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\mathcal{E}}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right). \tag{10}$$

Таким образом, отклик двухуровневой системы с релаксацией на гармоническое поле оказывается гармоническим - имеющим частоту внешнего поля.

Значения u_s и v_s определяют значения действительной и мнимой частей гармонической восприимчивости $\chi(\omega)$:

$$\chi'(\omega) = -w_0 \frac{d^2}{\hbar} \cdot \frac{\Delta}{\Gamma_2^2(1+\xi)+\Delta^2}, \qquad (11)$$

$$\chi''(\omega) = -w_0 \frac{d^2}{\hbar} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_2^2(1+\xi)+\Delta^2}. \qquad (12)$$

★ Выше мы ввели новый термин - *гармоническая восприимчивость*. Он необходим потому, что правые части выражений для $\chi'(\omega)$ и $\chi''(\omega)$ **зависят** от напряженности поля: отклик двухуровневой системы с релаксацией на гармоническое поле в полученном нами приближении не является линейным.

◆ Основной эффект релаксации - уширение линий излучения/поглощения. В слабом поле оно может быть учтено заменой $\Delta \to \Delta + i\Gamma_2$. Этот результат может быть перенесен и в теорию возмущений: при учете релаксации параметром разложения становится (см. §9.1, ф-ла (3)) величина

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\sqrt{\Delta^2+\Gamma_2^2}}. \qquad (13)$$

Воздействие внешнего гармонического поля на квантовую систему с релаксацией может быть описано методами теории возмущений при **любой** частоте поля, если выполнено условие $\beta_r(0) = \Omega/\Gamma_2 << 1$.

★ Если принять, что поперечная релаксация определяется спонтанным излучением, $\Gamma_2 \sim 10^6$ с$^{-1}$, то границе применимости теории возмущений в стандартных предположениях соответствует интенсивность излучения $I \sim 10^{-12} I_s \sim 10^{-4}$ Вт см$^{-2}$. Типичным для многих механизмов является значение $\Gamma_2 \sim 10^{10}$ с$^{-1}$. В этом случае граница применимости теории возмущений сдвигается до $I \sim 10^{-4} I_s \sim 10^4$ Вт см$^{-2}$, что приблизительно соответствует интенсивности излучения импульсных лазеров со свободной генерацией.

◆ В более точном приближении величина уширения спектральной линии δ зависит от амплитуды поля - увеличивается с ее ростом:

$$\delta = \Gamma_2 \sqrt{1+\xi}. \qquad (14)$$

★ Проведем оценку границы области, где зависимость ширины линии от амплитуды поля становится существенной: $\xi = 1$. Принимая для Γ_1 значение, типичное для естественного уширения (§17.3) $\Gamma_1 \sim 10^6$ с$^{-1}$, а для скорости поперечной релаксации Γ_2 - типичное для многих механизмов значение $\Gamma_2 \sim 10^{10}$ с$^{-1}$. Тогда равенство $\xi = 1$ достигается при $\Omega \sim 10^8$ с$^{-1}$, что соответствует интенсивности излучения $I \sim 10^{-8} I_s \sim 1$ Вт см$^{-2}$.

◆ Адиабатическое приближение. Если $\Gamma_2 >> \Gamma_1$, то можно заменить u и v их выражениями (2) через w, пригодными в стационарном случае. От системы для компонент вектора Блоха останется одно уравнение, описывающее изменение разности населенностей:

$$\dot{w} + \Gamma_1 (w - w_0) + \frac{\Omega^2 \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2} w = 0. \tag{15}$$

Это уравнение называется *скоростным*, или *балансным*. Привлекая золотое правило Ферми для переходов в непрерывный спектр под действием гармонического поля (см. §3.1), можно интерпретировать эту формулу как выражение для скорости перехода в непрерывный спектр с плотностью состояний

$$\rho(\Delta) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2}. \tag{16}$$

При этой интерпретации уровень энергии дискретного спектра при учете релаксации оказался эффективно размытым в полосу конечной ширины. Таким образом, при условиях $\Gamma_2 >> \Gamma_1$ и $\Gamma_2 >> \Omega$ эволюцию двухуровневой системы с релаксацией в гармоническом поле можно описывать балансным уравнением для разности населенностей.

★ Аналогичные уравнения могут быть записаны для многоуровневых систем и являются распространенной моделью для описания кинетики медленных процессов в лазерах.

§ 18.2 Концепция сильного поля

◆ В предыдущих разделах описание эволюции квантовой системы с дискретным спектром строилось на разложении ВФ по базису СФ невозмущенного гамильтониана системы. Такой подход эффективен, если внешнее поле мало по сравнению со внутриатомным электрическим полем. Во многих экспериментальных ситуациях это условие выполнено. Характерный атомный масштаб поля

$$\mathcal{E}_a = \frac{e}{a_0^2} = \frac{m^2 e^5}{\hbar^4} = 1.72 \cdot 10^7 \text{ Гс} \tag{17}$$

и неравенство $\mathcal{E} << \mathcal{E}_a$ обеспечивает правомерность подхода.

◆ Нарушить неравенство $\mathcal{E} << \mathcal{E}_a$ можно тремя способами:

- грубой силой увеличением интенсивности лазерного излучения (см. L01 - о лазерных рекордах). При этом могут пострадать и другие детали развиваемой нами схемы - в частности, предположение о применимости нерелятивистского приближения для описания невозмущенного атома.

★ При движении свободного электрона в поле плоской электромагнитной волны в нерелятивистском приближении амплитуда колебаний скорости достигнет скорости света при значении напряженности поля $\mathcal{E}_c = m\omega c e^{-1} = 1.01 \cdot 10^8$ Гс. Для отношения этой величины к атомному масштабу напряженности поля получаем

$$\frac{\mathcal{E}_c}{\mathcal{E}_a} = \frac{1}{\alpha}\left(\frac{\omega}{\omega_a}\right). \tag{18}$$

Выполнение условий применимости нерелятивистского приближения $\mathcal{E} << \mathcal{E}_c$ в сильном поле $\mathcal{E} >> \mathcal{E}_a$ возможно только в высокочастотных полях $\omega >> 10^2 \omega_a$.

- увеличением среднего расстояния атомного электрона от ядра. Например, в ридберговском состоянии с большим главным квантовым числом $n >> 1$ среднее расстояние электрона от ядра $a \sim a_0 n^2$, и характерное значение поля $\mathcal{E}_n \sim \mathcal{E}_a n^{-4}$.

★ В состоянии с $n = 100$ характерное значение $\mathcal{E}_n \sim 10^{-8} \mathcal{E}_a \sim 0.1$ Гс, что соответствует интенсивности излучения $I_n \sim 1$ Вт см$^{-2}$. Частота орбитального движения в этом состоянии $\omega_n \sim n^{-3} \omega_a \sim 4 \cdot 10^{10}$ с$^{-1}$ лежит в хорошо освоенном диапазоне сантиметровых волн.

- уменьшением эффективного заряда ядра.

★ Например, электрон над поверхностью жидкого гелия [Э80] притягивается к ней силами взаимодействия с электростатическим изображением. Потенциал такого взаимодействия имеет вид

$$U(r) = -\frac{e^2}{2r} \cdot \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}, \tag{19}$$

где ε - диэлектрическая проницаемость. Для жидкого гелия $\varepsilon - 1 \sim 10^{-2}$, что соответствует уменьшению эффективного заряда (и соответствующего характерного поля) на два порядка.

[Э80] - Эйдельман В.С. УФН, 1980, т. 130, вып. 4, с. 675-706.

◆ Сказанное выше относится к электронам в состояниях дискретного спектра. Для состояний непрерывного спектра соответствующий $\mathcal{E}_a$ масштаб равен нулю. До сих пор состояния непрерывного спектра (например, в теориях фотоионизации, L03 и L10) мы рассматривали, описывая их ВФ свободной частицы - решениями УШ в полном пренебрежении внешним полем. Вопрос о правомерности такого подхода требует отдельного рассмотрения.

◆ Принципиальная основа рассматриваемых ниже методов состоит в использовании в качестве нулевого приближения модели, описывающей электрон в поле электромагнитной волны, и учитывающей по возможности точно эффекты взаимодействия электрона со внешним полем. Взаимодействие электрона с ядром (или атомным остатком) будет учитываться как возмущение.

§ 18.3 Свободный электрон в поле волны

◆ Поле плоской электромагнитной волны опишем моделью переменного электрического поля

$$\vec{E}(t) = \vec{E}\cos\omega t, \quad \vec{H}(t) = 0. \qquad (20)$$

Такое поле может быть описано однородным в пространстве векторным потенциалом

$$\vec{A}(t) = -\frac{c}{\omega}\vec{E}\sin\omega t. \qquad (21)$$

☆ Почему можно пренебречь магнитным полем той же амплитуды, что и электрическое? Описанному подходу есть очевидная альтернатива - перенести все взаимодействие на скалярный потенциал. Почему мы ей не пользуемся?

Нестационарное уравнение Шредингера для электрона в поле с векторным потенциалом (21) имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left[\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}(t)\right]^2\Psi. \qquad (22)$$

Гамильтониан не содержит пространственных координат, поэтому импульс электрона является интегралом движения. Подставляя решение в виде

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathcal{N}\exp i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\cdot\varphi(t), \qquad (23)$$

для функции $\varphi(t)$ получим уравнение первого порядка с разделяющимися переменными, которое элементарно интегрируется. В итоге для зависящей от времени части ВФ получаем выражение

$$\varphi(t) = \exp\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m}t - \frac{e\vec{p}\vec{E}}{m\omega^2}\cos\omega t + \frac{e^2\vec{E}^2}{4m\omega^2}\left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega}\right)\right]. \qquad (24)$$

◆ Решение (23) по форме представляет собой волновую функцию *квазиэнергетического* состояния свободного электрона (см. §14.5). Величина квазиэнергетического сдвига,

$$\Delta E = \frac{e^2\vec{E}^2}{4m\omega^2}, \qquad (25)$$

в стандартных условиях пренебрежимо мала: $\Delta E_s = 1.69\cdot 10^{-17}$ эрг $=$ $= 1.0\cdot 10^{-5}$ эВ. Подметим, однако, что сдвиг ΔE неограниченно растет при уменьшении частоты поля.

Периодически зависящая от времени часть ВФ КЭС может быть разложена в ряд Фурье. Каждое слагаемое со временной зависимостью вида $\exp(\pm in\omega t)$ может интерпретироваться как компонента, в которой энергия электрона отличается от его средней квазиэнергии на несколько $(\mp n\hbar\omega)$ квантов энергии поля.

В использованном приближении рассеяния света на свободном электроне нет. Сохранение импульса электрона приводит к тому, что среднее значение дипольного момента в данном состоянии не зависит от времени, а переходы в состояния с другими значениями импульса невозможны. Однако построенная ВФ может быть использована для рассмотрения задач, в которых частица взаимодействует не только со внешним полем.

EOL ☯