

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

539.184

**РАССЕЯНИЕ И ИЗЛУЧЕНИЕ КВАНТОВОЙ СИСТЕМОЙ В СИЛЬНОЙ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЕ *)****Я. Б. Зельдович**

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	139
2. Эволюция системы	141
3. Излучение собственных состояний $\mathcal{H}(t)$	143
4. Двухуровневая система	145
5. Спонтанные переходы	147
6. Квазиэнергия и линейный штарк-эффект	147
7. Численные оценки	149
8. Заключительные замечания	149
Список обозначений	150
Цитируемая литература	151

1. ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие сильной монохроматической электромагнитной волны с квантовомеханической системой (атомом, молекулой) представляет особый интерес в связи с развитием мазеров и лазеров.

Когерентное рассеяние монохроматической волны, зависимость сечения рассеяния и показателя преломления от амплитуды, когерентная генерация гармоник, некогерентное излучение на собственных частотах атома, изменение этих частот под влиянием волны — вот краткий неполный перечень возникающих вопросов. Эти эффекты рассмотрены в целом ряде работ, из которых назовем наиболее интересные ¹, в которых приведены также ссылки на предыдущие работы. При этом использовались различные методы: теория возмущений (с зависящим от времени потенциалом), матрица плотности (с учетом диссипации) и другие. В последнее время подробный и строгий обзор нестационарной теории возмущений дан Лангхоффом и др. ². Вопросы излучения возмущенных состояний в обзоре ² не рассматриваются.

Однако наиболее последовательным, систематическим и в то же время простым методом является использование квазиэнергии и квазиэнергетических состояний (ниже кратко — КЭС). Поэтому в качестве методического усовершенствования, не претендуя на новые результаты, изложим метод квазиэнергии. В этом методе влияние классической электромагнитной волны на атом учитывается точно (по крайней мере в принципе), а спонтанное излучение — как малое диссипативное возмущение. Такой метод в точности эквивалентен стандартной теории свободного атома,

*) Доложено на Конференции по сильным электромагнитным волнам (Венгрия, Балатон, сентябрь 1972 г.)

в который сперва находят точные решения уравнения Шрёдингера без учета спонтанного излучения и получают набор уровней энергии и собственных (стационарных) состояний. Спонтанное излучение рассматривается как малое возмущение системы. При этом, в принципе, с учетом излучения только нижнее состояние оказывается в точности стационарным. Замечательно, что при наличии сильной волны, в таком же приближении с учетом спонтанных процессов, все состояния качественно одинаковы в том смысле, что ни одно из КЭС не является строго стационарным. Напомним историю понятия квазиэнергии.

Для электрона в периодическом (по пространству) поле кристаллической решетки общеизвестно, что существует и сохраняется квазиимпульс p , $\psi(x+a) = e^{ipa} \psi(x)$, где a — постоянная решетки и положено $\hbar = 1$. Рассматривая электрон (релятивистский, подчиняющийся уравнению Дирака) в поле сильной волны, Никишов и Ритус³ ввели понятие четырехмерного квазиимпульса. Его четвертая компонента была названа квазиэнергией.

В 1966 г. практически одновременно появились две работы^{4,5}, в которых понятие квазиэнергии применялось к атомной системе в поле волны (см. также^{6,7}). В работе Ритуса⁴ рассматривается конкретный способ получения волновых функций КЭС. По определению, это есть функция, удовлетворяющая условию

$$\psi_k(t+T) = e^{-iF_k T} \psi_k(t). \quad (1)$$

Если выделить гармонический множитель, ее можно записать в виде

$$\psi_k(t) = e^{-iF_k t} \varphi_k(t), \quad (2)$$

где $\varphi_k(t+T) = \varphi_k(t)$, так что $\varphi_k(t)$ есть строго периодическая (но не гармоническая) функция времени *). ψ_k и φ_k зависят также от x .

Функция ψ_i может быть разложена в ряд Фурье:

$$\psi_i = \sum_{n=-\infty, k=0}^{n=+\infty, k=\infty} c_{ink} \varphi_k(x) e^{-i(F_i + n\omega)t}, \quad \omega = 2\pi/T. \quad (3)$$

Ритусом построены уравнения для определения коэффициентов c_{ink} и самой квазиэнергии F_i .

В работе Зельдовича⁵ также вводится понятие квазиэнергии и КЭС конкретный способ расчета F_i и ψ_i не рассмотрен, зато подробно рассматривается вопрос об излучении системы. Отмечено, в частности, что F_i определено по модулю ω , т. е. $F_i = F_i \pm \omega = F_i \pm 2\omega$, поэтому нельзя сказать, что, например, $F_2 > F_1$, так как всегда можно подобрать **) целые (не обязательно положительные) m и n так, чтобы оказалось

$$F_2 + n\omega < F_1 + m\omega.$$

Поэтому возникает демократия — все КЭС спонтанно переходят друг в друга, нет энергетических запретов, поскольку сильная волна является резервуаром энергии. Остаются в силе лишь запреты типа четности. Переход между заданными двумя состояниями 2 и 1 дает не одну линию, а серию, в соответствии с тем, что квазиэнергия определена по модулю ω .

*) Обратите внимание на то, что в (1) в экспоненте $F_k T$ — числа, а в (2) в экспоненте $F_k t$ — линейная функция времени.

**) Однако при таком изменении определения F_i одновременно меняется соответствующая функция φ_i , сохраняя, однако, свое свойство периодичности. С другой стороны, ниже отмечена возможность получить КЭС плавным переходом от строго стационарного состояния для независимого от времени гамильтониана $\mathcal{H}_0$. В последнем случае энергия k -го состояния E_k определена однозначно. В процессе плавного перехода можно проследить, какое из значений $F_k + n\omega$ переходит в E_k ; это значение F_k естественно назвать главным значением, а остальные, отличающиеся на целое кратное ω , — сателлитами.

Однако так как модуль этот одинаков для обоих состояний, серия однопараметрическая, частота зависит от $(n - m)$, но не от n и m по отдельности.

Очевидно, что отдельные члены фурье-разложения дают результаты, не отличающиеся от стандартной теории возмущений. Понятие квазиэнергии полезно, но не необходимо. Однако сильные нелинейные эффекты было бы трудно рассматривать, если игнорировать квазиэнергию.

Вблизи резонанса, т. е. при $E_2 - E_1 - n\omega \ll \omega$, КЭС существенно отличаются от стационарных собственных состояний невозмущенного атома уже при сравнительно слабом электромагнитном поле мазерной или лазерной волны. Именно в этой ситуации особенно плодотворен выход за рамки теории возмущений, осуществляемый с помощью теории КЭС. В ряде случаев разности энергий внутри определенной группы уровней (два уровня или больше, но не континуум!) малы и существенно перемешивание этих уровней между собой сравнительно слабым полем; далекие уровни и ионизационный континуум остаются незатронутыми.

Напротив, в случае оптических переходов в атоме вдали от резонанса одновременно с нелинейными эффектами возникает сильная ионизация атома и наблюдение нелинейных эффектов окажется затруднительным. В этом случае спектр квазиэнергии оказывается сплошным, дискретные состояния имеют комплексную квазиэнергию, мнимая часть которой характеризует вероятность ионизации атома в данном состоянии волной. К числу тех случаев, в которых можно надеяться на полезное применение квазиэнергии, относятся: близкие уровни атомов и молекул, возникающие в результате спин-орбитального или сверхтонкого расщепления; система вырожденных уровней атома водорода и почти вырожденные водородоподобные высокие уровни атомов и ионов; вращательные уровни дипольных молекул, в частности — с расщеплением под действием магнитного поля; пары уровней, возникающие при наличии двух равноценных состояний с малой вероятностью спонтанного перехода между ними *). В конце статьи некоторые из перечисленных примеров рассматриваются подробнее.

2. ЭВОЛЮЦИЯ СИСТЕМЫ

Рассмотрим подробнее аналогию между стационарными состояниями невозмущенной системы и КЭС системы в периодическом поле и применение этих понятий в задаче об эволюции системы.

В обоих случаях имеет место уравнение Шрёдингера

$$i\partial\Psi/\partial t = \mathcal{H}\Psi, \quad (4)$$

причем в невозмущенном случае $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(x, \partial/\partial x)$ не зависит от времени. Таким образом, перед нами линейное дифференциальное уравнение в частных производных. Однако никто, даже при наличии сверхмощной электронно-вычислительной машины, не станет решать это уравнение численно **), разностным методом, находя приращения

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \Psi(x, t) - i\mathcal{H}_0\Psi(x, t) \Delta t. \quad (5)$$

Вместо этого решение разбивается на несколько этапов:

1) находим собственные состояния, т. е. частные решения вида

$$\psi_k = \varphi_k(x) e^{-iE_k t}; \quad (6)$$

*) Отметим также применение квазиэнергии при рассмотрении электрона под действием двух полей — постоянного магнитного поля и поля волны ⁸.

**) Нижеследующее относится к ситуации, когда главную роль играют дискретные состояния. В сплошном спектре, в частности для свободного электрона, прямые методы могут быть эффективны.

2) произвольное начальное состояние $\Psi(x, t_0)$ представляем как суперпозицию собственных состояний, т. е. находим c_k в выражении

$$\Psi(x, t_0) = \sum_k c_k \varphi_k(x) e^{-iE_k t_0}; \quad (7)$$

3) после этого решение задачи об эволюции, т. е. о вычислении значения $\Psi(x, t)$ в произвольный момент времени, выписывается немедленно:

$$\Psi(x, t) = \sum_k c_k \varphi_k(x) e^{-iE_k t}. \quad (8)$$

Эта процедура общеизвестна. Здесь она приведена для того, чтобы показать полную аналогию с теорией квазиэнергии. Пусть $\mathcal{H} = \mathcal{H}(x, \partial/\partial x, t)$ содержит время t в явном виде. Тогда решений типа (6) не существует. Однако при периодической зависимости $\psi(t+T) = \psi(t)$ можно найти КЭС, т. е. решения, периодически воспроизводящие себя. Таким образом, при периодическом $\mathcal{H}(t)$ первый этап состоит в нахождении решений вида

$$\psi_k = \varphi_k(x, t) e^{-iF_k t}, \quad (9)$$

где φ_k не постоянны, но зависят от времени периодически. Второй этап состоит в разложении произвольной, заданной в момент t_0 функции $\Psi(x, t_0)$:

$$\Psi(x, t_0) = \sum_k c_k \varphi_k(x, t_0) e^{-iF_k t_0}. \quad (10)$$

Найдя коэффициенты c_k , конструируем решение, удовлетворяющее как уравнению Шрёдингера, так и начальному условию в момент t_0 :

$$\Psi(x, t) = \sum_k c_k \varphi_k(x, t) e^{-iF_k t} = \sum_k c_k \psi_k. \quad (11)$$

Итак, аналогия является полной. Коэффициенты, с которыми входят различные ψ_k , строго постоянны, общий характер решения непосредственно ясен.

Общим для решения с не зависящим от времени гамильтонианом $\mathcal{H}_0$ и с периодическим $\mathcal{H}(t)$ является то, что спонтанное излучение (переходы из одного состояния в другое) пока не учитывается. Принципиальной основой в случае с $\mathcal{H}_0$ является существование полного ортонормированного набора функций $\varphi_k(x)$, являющихся решением уравнения на собственные значения

$$\mathcal{H}_0 \varphi_k(x) = E_k \varphi_k(x).$$

В случае периодического потенциала математическая формулировка задачи о нахождении $\varphi_k(x, t)$ — функций КЭС, — на первый взгляд, совершенно иная, ее нельзя свести к задаче с исключенным временем. Оказывается, однако, что и КЭС образуют полную ортонормированную систему.

Практически, как правило, периодический потенциал состоит из не зависящего от времени гамильтониана $\mathcal{H}_0$ и периодической части $\mathcal{H}'(t)$, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$. Задача, однако, ставится как определение точных решений уравнения Шрёдингера для $\mathcal{H}(t)$, в отличие от теории возмущений, в которой $\mathcal{H}'$ считался бы малым. Тем не менее можно проследить соответствие между решениями для $\mathcal{H}_0$ и решениями для $\mathcal{H}(t)$. Формально для этого введем параметр α , определим $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \alpha \mathcal{H}'$ и проследим, как изменяются решения при изменении α от 0 до 1. При этом каждой собственной функции $\mathcal{H}_0$ окажется сопоставленным одно квазиэнергетическое решение. Если рассматривается замкнутая группа состояний $\mathcal{H}_0$,

которые «перемешиваются» между собой «возмущением» $\alpha \mathcal{H}'$, то ясно, что число КЭС не отличается от первоначального числа состояний $\mathcal{H}_0$.

В этом случае можно указать и ясный алгоритм нахождения волновых функций КЭС и значений квазиэнергии. Ниже мы конкретно рассмотрим простейший пример группы, состоящей из двух состояний.

От математической задачи о состояниях, зависящих от параметра α в гамильтониане $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \alpha \mathcal{H}'(t)$, перейдем к физической задаче о плавном включении периодического потенциала. Пусть $\alpha = \alpha(t)$ медленно (за время гораздо больше периода T , который считается постоянным) нарастает от 0 до 1. Если в начальный момент при $\alpha = 0$ система находится в заданном k -м состоянии $\mathcal{H}_0$, то при медленном росте α система перейдет в чистое k -е КЭС *).

Таким образом, КЭС имеют ясный физический смысл состояний, получающихся при плавном включении периодического возмущения $\mathcal{H}'$. Более того, мы получили неочевидную теорему: из собственного состояния $\mathcal{H}_0$ путем плавного включения $\mathcal{H}'$ получается состояние, обладающее свойством периодичности с периодом T , равным периоду $\mathcal{H}'$ (см. обзор ²). Если воспользоваться этим свойством, можно найти интересующее нас решение гамильтониана $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, даже не рассматривая процесс включения $\mathcal{H}'$.

Эти утверждения безусловно правильны в случае конечной группы состояний и при дополнительном условии, чтобы не имел место точный резонанс: $F_n - F_k \neq m\omega$, где m — целое. Когда играет роль континуум, необходимо дополнительное исследование. Точный резонанс, по-видимому, существует лишь для невзаимодействующих уровней, подобно тому как не пересекаются термы одинаковой симметрии в стационарной теории.

3. ИЗЛУЧЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ СОСТОЯНИЙ, $\mathcal{H}(t)$

В предыдущем разделе было подчеркнуто сходство КЭС и обычных собственных состояний $\mathcal{H}_0$, в частности, полная аналогия в решении задачи эволюции произвольного начального состояния. Следует, однако, видеть не только сходство, но и отличие КЭС от стационарных состояний. Это отличие наиболее ярко проявляется при рассмотрении излучения самой системы, которое не включено в гамильтонианы $\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{H}'$.

В случае стационарных состояний излучение имеет место лишь при переходе из верхнего состояния в нижнее. Между тем КЭС излучает само по себе (данное n -е КЭС, без перехода в другие $n \pm 1$, $n \pm 2$, ...). Величина $\int \psi_n^* x \psi_n dV$ не постоянна, а меняется со временем с периодом волны. Из условия периодичности $\psi_n(x, t)$ следует, что излучается электромагнитная волна, с тем же периодом, что и возбуждающая. Однако излучаемая волна не гармоническая! Ее фурье-разложение содержит главную компоненту с частотой ω и малые компоненты-гармоники — с частотами $n\omega$, кратными ω .

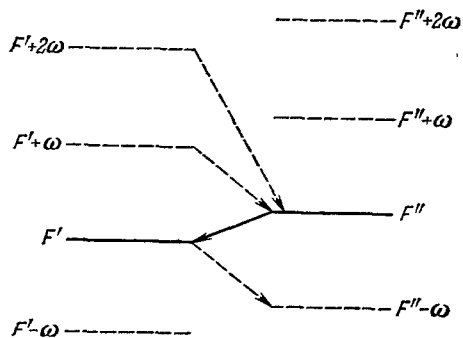
Очевидно, что это излучение надо классифицировать как когерентное рассеяние; излучение данного КЭС (без перехода в другое!) даст вклад в вещественную часть показателя преломления среды, заполненной рассматриваемыми атомами. Можно вычислить нелинейную поляризуемость среды и изменение формы волны за счет гармоник.

Переходы между различными КЭС подобны переходам из возбужденного стационарного состояния в основное (или из одного возбужденного

*) При мгновенном включении ($\alpha = 0$, $t < t_1$; $\alpha = 1$, $t > t_1$) нам пришлось бы разложить $\varphi_k(x)$ по $\varphi_n(x, t_1)$, и при этом, в принципе, коэффициенты c_{nk} с $n \neq k$ не равны нулю.

в другое). Такие переходы происходят вероятностным образом и сопровождаются излучением фотонов с частотой, характерной для атома, т. е. отличной от частоты волны.

Еще в разделе 1 (введении) было отмечено, что при наличии двух КЭС ψ_n и ψ_k нельзя сказать, какое из них обладает большей квазиэнергией, какое меньшей (см. рисунок). Спонтанные переходы идут в обоих направлениях: $\psi_n \rightarrow \psi_k$ с излучением $\omega' = F_n - F_k + p\omega$



и $\psi_k \rightarrow \psi_n$ с излучением $\omega'' = F_k - F_n + q\omega$, где p и q — целые *), такие, что $\omega' > 0, \omega'' > 0$. По совокупности, переход $n \rightarrow k \rightarrow n$ сопровождается излучением двух квантов, таких, что $\omega' + \omega'' = (p + q)\omega$, в силу чего энергия, заимствованная из поля сильной волны (из $\mathcal{H}(t)$), равна целому кратному частоты ω сильной волны, чего и следовало ожидать.

Вероятность перехода мы считаем малой и не учитываем естественной ширины уровней квазиэнергии. Однако отношение вероятностей переходов $\psi_n \rightarrow \psi_k$ и $\psi_k \rightarrow \psi_n$ существенно, так как от него зависит стационарное количество атомов в различных состояниях **), а следовательно, и усредненные по ансамблю атомов характеристики излучения и показателя преломления.

Особо интересен вопрос об инверсности. В статическом поле ($\mathcal{H}_0$) можно выбрать инверсное начальное состояние, т. е. задать начальные концентрации $N_k > N_n$ при $E_k > E_n$. Создав резонатор, настроенный на частоту $\omega_{kn} = E_k - E_n$, получим когерентный («лазерный») импульс. В отсутствие резонатора получим спонтанное излучение частоты ω_{kn} . Однако с течением времени все атомы перейдут путем излучения в нижнее энергетическое состояние. В поле $\mathcal{H}_0$ без подкачки энергии возбужденные состояния и, в частности, инверсное состояние совокупности атомов существуют лишь ограниченное время.

Совершенно иначе обстоит дело в системе, находящейся в периодическом поле $\mathcal{H}(t)$ в квазиэнергетической ситуации. Выше было отмечено, что в такой системе происходят спонтанные переходы, в принципе, из всех состояний во все состояния. При $t \rightarrow \infty$ устанавливается определенное распределение атомов по КЭС, характеризуемое набором чисел N_k , где k — номер КЭС. Все эти числа отличны от нуля при $t \rightarrow \infty$.

Но если есть спонтанные оптические переходы между каждой парой уровней в обе стороны, $k \rightleftharpoons n$, притом с разными частотами ω' и ω'' , то для одного из этих переходов, например для $k \rightarrow n$, $\omega'' = F_k - F_n + q\omega$ (см. выше), — ситуация инверсная, если $N_k > N_n$. Напомним смысл инверсности. До сих пор рассматривалось лишь спонтанное излучение на частоте ω'' . Однако если есть спонтанное излучение, то существует и пропорциональное ему индуцированное излучение, есть и поглощение излучения при обратном переходе. Соотношение концентраций $N_k > N_n$ приводит к тому, что индуцированное излучение сильнее поглощения. Итак, хотя спонтанное излучение на частоте ω'' может оказаться слабее

*) Не обязательно положительные. Возможно также, что одно из них равно нулю.

**) Без учета спонтанных переходов это количество зависело бы от начальных условий и способа включения волны.

спонтанного излучения других линий, например ω' , все-таки излучение ω'' может быть усилено до лазерного импульса подходящим резонатором. Практически следует ожидать, что в стационарном состоянии все же наиболее населенным будет наинизшее КЭС. Точнее, следуя всем правилам игры, это КЭС надо назвать длинно: «КЭС, адиабатически получаемое из нижнего уровня не зависящего от времени $\mathcal{H}_0$ ».

Если $\mathcal{H}'(t)$ мало, то соответственно малы высокочастотные компоненты в этом состоянии (далекие сателлиты с большими p), мала вероятность спонтанного перехода «бывшего нижнего» в одно из «бывших верхних» состояний, а следовательно, предъявляются высокие, трудные требования к добротности резонатора на ω'' , обеспечивающей генерацию.

Мы не рассматривали здесь целый ряд вопросов, важных для практического расчета генерации (например, доплеровское уширение линий, кинетику накопления инверсности и т. п.). В рамках теоретической статьи о квантовомеханических системах в периодическом поле нужно ограничиться указанием на принципиальную возможность генерации когерентного излучения на частоте, отличной от частоты накачки.

Общие соображения, приведенные выше, в значительной части высказывались раньше^{1,5}.

4. ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА

Покажем, следуя⁴, как соображения о квазиэнергии реализуются в простейшем случае двухуровневой системы. Спонтанное излучение в данном разделе игнорируем. Волновая функция и эволюция этой системы полностью определяются двумя амплитудами — $a(t)$ и $b(t)$:

$$\Psi(x, t) = a(t) \varphi(x) + b(t) \chi(x), \quad (12)$$

где φ и χ — пространственные части стационарных состояний невозмущенной системы с энергиями A и B . Таким образом, для невозмущенной системы имеем

$$\Psi_0 = a_0 e^{-iAt} \varphi(x) + b_0 e^{-iBt} \chi(x). \quad (13)$$

Предположим, что φ и χ имеют разную четность; в дипольном приближении взаимодействие с полной энергией E дается матричным элементом

$$M = eE \int \varphi(x) x \chi(x) dv, \quad (14)$$

в силу чего окончательно уравнение Шрёдингера при наличии поля имеет вид

$$\begin{aligned} i da/dt &= Aa + 2V \cos \omega t \cdot b, \\ i db/dt &= 2V \cos \omega t \cdot a + Bb; \end{aligned} \quad (15)$$

здесь положено $\hbar = 1$, величина V пропорциональна амплитуде волны и матричному элементу, число 2 выделено для удобства, ω — частота волны.

Решение с квазиэнергией F запишем сразу в виде рядов Фурье, т. е.

$$\begin{aligned} a(t) &= \alpha_0 e^{-iFt} + \alpha_2 e^{-i(F+2\omega)t} + \alpha_{-2} e^{-i(F-2\omega)t} + \dots, \\ b(t) &= \beta_1 e^{-i(F+\omega)t} + \beta_{-1} e^{-i(F-\omega)t} + \beta_3 e^{-i(F+3\omega)t} + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Очевидно, что эти ряды тождественно удовлетворяют условию $a(t+T) = e^{-iFT} a(t)$ и аналогично для b , так как $T = 2\pi/\omega$. Удобно записать $2 \cos \omega t = e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}$, при этом становятся очевидными правила четности номеров для рядов Фурье для a и b .

Подставляя ряды в уравнение, получим бесконечную систему зацепляющихся уравнений для коэффициентов. Приравнявая детерминант

нулю, находим два собственных значения F' , F'' и затем коэффициенты α'_n , β'_n , α''_n , β''_n , соответствующие этим двум решениям. Запишем эту систему, точнее, первые два уравнения:

$$F\alpha_0 = A\alpha_0 + V(\beta_1 + \beta_{-1}), \quad (F + \omega)\beta_1 = B\beta_1 + V(\alpha_0 + \alpha_2). \quad (17)$$

Пусть

$$B > A, \quad \omega - (B - A) = \delta \quad (\delta < \omega); \quad V < B - A.$$

Тогда разумная итерация дает $F = A + \varepsilon$ ($\varepsilon < \omega$),

$$\begin{aligned} \varepsilon\alpha_0 &= V\beta_1, \quad (\delta + \varepsilon)\beta_1 = V\alpha_0, \quad \varepsilon(\delta + \varepsilon) = V^2, \\ \varepsilon', \varepsilon'' &= -(\delta/2) \pm [(\delta^2/4) + V^2]^{1/2}. \end{aligned} \quad (18)$$

При адиабатическом включении волны (путем увеличения V от $V = 0$ при $\omega = \text{const}$) первое состояние, соответствующее решению ε' (знак +), получится из нижнего состояния:

$$V \rightarrow 0, \quad F' = A + (V^2/\delta), \quad \alpha'_0 = 1 - (V^2/2\delta^2), \quad \beta'_1 = V/\delta. \quad (19)$$

Второе состояние ε'' также соотносится с верхним невозмущенным состоянием:

$$\begin{aligned} V \rightarrow 0, \quad F'' &= A - \delta - (V^2/\delta) = B - \omega - (V^2/\delta), \\ \alpha''_0 &= -V/\delta, \quad \beta''_1 = 1 - (V^2/2\delta^2). \end{aligned} \quad (20)$$

На первый взгляд кажется странным, что квазиэнергия не стремится к энергии невозмущенного верхнего состояния B при $V \rightarrow 0$. Но здесь как раз проявляется тот факт, что F определено по модулю ω . Во втором решении главный член при $V \rightarrow 0$ есть $\psi'' = \beta''_1 e^{-i(F+\omega)t} \chi \rightarrow \chi e^{-iBt}$, как и следовало ожидать.

При $V \sim \delta$ коэффициенты α_0 и β_1 одного порядка; в частности, при $V \gg \delta$

$$\begin{aligned} F' &= A + V, \quad \psi' = e^{-i(A+V)t} (\varphi + e^{-i\omega t} \chi), \\ F'' &= A - V, \quad \psi'' = e^{-i(B-V)t} (\varphi e^{i\omega t} - \chi). \end{aligned} \quad (21)$$

Типичный «резонансный» случай заключается в том, что V и δ могут быть в любом соотношении $V \leq \delta$, но обе величины V и δ малы по сравнению с $B - A$. Тогда легко убедиться, что отброшенные члены ряда ($\alpha_{\pm 2, \pm 4}$, $\beta_{-1, \pm 3} \dots$) представляют собой разложение по степеням возмущения, например

$$\alpha'_{\pm 2} \sim V^2/(B-A)^2; \quad \beta'_{-1}, \beta'_{+3} \sim V^3/(B-A)^3, \quad \alpha'_{\pm 4} \sim V^4/(B-A)^4 \text{ и т. д.}$$

При фиксированном V/δ можно говорить и о разложении по степеням «резонансности» δ/ω . В выражения для высших членов в знаменатель войдут $B - A + \omega$, $B - A + 2\omega \dots$

Итерация и весь квазиэнергетический подход хороши в том случае, если мала естественная ширина верхнего стационарного состояния γ_0 (вероятность спонтанного перехода $B \rightarrow A$): $\gamma_0 = W_{BA} \ll B - A$; тогда есть область

$$B - A \sim \omega \gg \delta \gg \gamma_0.$$

Уже первое изложенное выше приближение (с оставлением α_0 и β_1) содержит нетривиальные результаты. Каждое из двух состояний F' и F'' имеет переменный дипольный момент, пропорциональный $\alpha'_0\beta'_1$ и $\alpha''_0\beta''_1$, соответственно изменяющийся со временем с частотой ω . При $V < \delta$ когерентное излучение $\sim V^2/\delta^2$, чему отвечает сечение рассеяния, не зависящее от амплитуды и лоренцовым образом зависящее от разности $\delta = \omega - (B - A) = \omega - \omega_0$. При $V > \delta$ имеет место насыщение: излучение стремится к постоянному пределу, в силу чего сечение падает как V^{-2} . Таким образом, в форме резонанса рассеяния V играет роль ширины;

чем сильнее волна, тем больше интервал частот, в котором сечение имеет плато.

Остановимся вкратце на истории вопроса. Методом адиабатической теории возмущений, без явного употребления понятий квазиэнергии и КЭС, двухуровневая система рассмотрена в работе Популяра⁹. В терминах квазиэнергии вопрос рассмотрен в работах¹⁰, включающих рассмотрение и рассеяния, и гармоник. Об учете квантованности электромагнитного поля при этом см.¹¹.

5. СПОНТАННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Обратимся к спонтанным переходам. Вероятность перехода $F'' \rightarrow F'$ пропорциональна $|\alpha_0 \beta_1'|^2$; при $V \rightarrow 0$ получаем максимальную вероятность, равную $\gamma_0 = W_{BA}$ невозмущенной системы. Вероятность обратного «неестественного» перехода $F' \rightarrow F''$ пропорциональна $|\beta_1' \alpha_0''|^2 \sim \sim V^4/\delta^4$ при $V < \delta$. Излучаемые частоты равны

$$\begin{aligned}\omega''' &= F'' - F' + \omega = B - A - (2V^2/\delta) = \omega - \delta - (2V^2/\delta), \\ \omega'''' &= F' - F'' + \omega = 2\omega - (B - A) + (2V^2/\delta) = \omega + \delta + (2V^2/\delta).\end{aligned}\quad (22)$$

Полный цикл $F' \rightarrow F'' \rightarrow F'$ сводится к излучению ω''' и ω'''' с отбором двух квантов энергии 2ω из классического поля волны. Отметим, что ширина спектральной линии спонтанных переходов ни при каком V не становится больше γ_0 , несмотря на расширение резонанса когерентного рассеяния. Применительно к спонтанному излучению, от амплитуды волны (от V) зависит смещение линий, но не их ширина.

В стационарном состоянии отношение числа атомов в F'' к числу в F' обратно отношению вероятностей. При $V < \delta$ имеем $n''/n' \sim V^4/\delta^4$. Однако при $V > \delta$ n' и n'' сравниваются. Эти два состояния дают вклад противоположного знака в вещественную часть амплитуды рассеяния вперед, т. е. в коэффициент преломления. Поэтому при увеличении V коэффициент преломления убывает как V^{-4} , т. е. быстрее, чем убывает сечение рассеяния.

Рассмотрение следующих членов разложения $\alpha_{\pm 2, \pm 4}$, $\beta_{-1, \pm 3} \dots$ позволяет вычислить когерентное излучение гармоник каждым из состояний. При этом легко убедиться, что возникают только нечетные гармоники 3ω , 5ω , пропорционально V^6 , V^{10} при малых V . Кроме того, можно найти вероятность спонтанного излучения $\pm(F'' - F') + n\omega$ с высокими n при переходах из одного КЭС в другое.

Выписанную выше систему уравнений можно применить и для определения вероятности возбуждения обертонов. Зададимся, например, $3\omega = B - A - \delta$, $\delta \ll \omega$, тогда получим резонансное решение с большими α_0 , β_1 , α_2 , β_3 с условием резонансности $\delta \sim V^3/\omega^2$.

Вероятно, развитый выше метод будет полезен и для многоуровневых атомно-молекулярных систем. При наличии сплошного спектра (кроме дискретного) у невозмущенной системы квазиэнергия становится комплексной, что описывает многофотонную ионизацию. Наконец, наряду со спонтанным излучением на частотах, отличных от ω , можно рассматривать и индуцированный процесс, т. е. генерацию на частотах ω' и ω'' таких, что $\omega' + \omega'' = n\omega$.

6. КВАЗИЭНЕРГИЯ И ЛИНЕЙНЫЙ ШТАРК-ЭФФЕКТ

В работах Коварского и Перельмана¹⁰ понятие квазиэнергии применяется к рассмотрению возбужденных уровней водорода. «Случайное» вырождение, например $2S$ - и $2P$ -уровней, делает возбужденные состояния, $n \geq 2$, водородного атома особо чувствительными к действию

электрического поля *). Как известно, именно в таких атомах имеет место линейный штарк-эффект. Из уровней $2S$ и $2P$, $m = 0$, можно построить линейные комбинации с определенным значением дипольного момента $\varphi_+ = (2S + 2P)/\sqrt{2}$, $\varphi_- = (2S - 2P)/\sqrt{2}$. В этом базисе электрическое поле даст диагональные матричные элементы; другими словами, поле не вызывает переходов из φ_+ в φ_- и из φ_- в φ_+ . Поэтому в данном случае волновые функции КЭС особенно просты:

$$\begin{aligned}\psi_+(x, t) &= (1/\sqrt{2}) e^{i\nu\cos\omega t} (2S + 2P), \\ \psi_-(x, t) &= (1/\sqrt{2}) e^{-i\nu\cos\omega t} (2S - 2P).\end{aligned}\quad (23)$$

Разложение функции $e^{i\nu\cos\omega t}$ в ряд Фурье общеизвестно: коэффициентом при $\cos(n\omega t)$ является функция Бесселя $J_n(\mu)$. Рассмотрим теперь спектр поглощения нормального атома водорода вблизи линии Ly_α , т. е. перехода $1S \rightarrow (2S, 2P)$. Если атомы находятся в поле сильной волны, линия Ly_α расщепится: появятся сателлиты $\omega_n = \omega_0 \pm n\omega$, где ω_0 — частота невозмущенной линии Ly_α . Амплитуда сателлитов зависит от амплитуды волны, в которой находятся атомы, как $J_n^2(\mu)$, где $\mu = eEa_0 \cdot \sqrt{3}/\omega$, E — поле волны, $ea_0 \cdot \sqrt{3}$ — дипольный момент водородного атома в состоянии $2S \pm 2P$. Итак, любопытно, что амплитуда сателлита периодически зависит от амплитуды волны. Чем выше номер сателлита n , тем большее поле необходимо для получения максимальной амплитуды данного сателлита (так ведут себя функции J_n).

На этом примере видна не только сила, но и трудность квазиэнергетического подхода. Дело в том, что здесь два КЭС вырождены как раз по той же причине, которая так облегчила нахождение этих состояний. Поэтому точное рассмотрение вероятности поглощения в окрестности Ly_α в зависимости от угла, поляризации, номера сателлита требует учета фазовых соотношений между двумя КЭС. Такое рассмотрение выходит за рамки данной статьи.

Без применения понятия квазиэнергии задача о возбуждении атома рассматривалась ранее ^{1,13}. Любопытно рассмотреть также вращательные уровни дипольной молекулы типа HCl или атомную систему с отличным от нуля угловым моментом, но без случайного вырождения. При $l \neq 0$ имеется $2l + 1$ подуровней. Из них можно составить линейные комбинации с определенным квадрупольным моментом, взаимодействующим с градиентом электрического поля сильной волны. С другой стороны, при переходах $l \rightarrow l'$ с разной четностью имеется дипольный матричный элемент, и при частоте сильной волны, близкой к резонансу, в КЭС перемешаны подуровни двух систем, l и l' . Правила перемешивания (отбора) зависят от поляризации сильной волны, например $m' = m \pm 1$ для плоской и $m' = m + 1$ для круговой поляризации **).

В случае двухатомной амплитуды с постоянным моментом инерции имеются целочисленные соотношения между энергиями последовательных уровней, резонанс для одного перехода (0—1) совпадает с резонансом высших порядков для следующих, с точностью до центробежной деформации молекулы.

Ситуация с магнитным диполем в магнитном поле, где соединяется эквидистантность и конечное число уровней, подробно рассмотрена в теории магнитного резонанса. Уже этот краткий перечень показывает, как широк класс явлений, к которым можно прилагать теорию квазиэнергии.

*) Влияние случайного вырождения в задаче о многофотонной ионизации атома рассмотрено Келдышем ¹².

**) Случай произвольного числа вырожденных состояний рассмотрен Коварским и Перельманом ¹⁴.

7. ЧИСЛЕННЫЕ ОЦЕНКИ

При какой величине поля, при какой мощности лазерного луча проявляются характерные явления, описанные выше? Явления в слабых полях можно описывать с помощью квазиэнергии, но они успешно описываются также стационарной теорией возмущений — это обстоятельство было отмечено уже на первой странице обзора. Преимущества квазиэнергетического подхода проявляются при таких полях, при которых первое исчезающее приближение теории возмущений недостаточно. Дадим оценку необходимого поля.

Начнем с наиболее простого случая (см. выше раздел 6 и работы ¹⁰) системы $(2S - 2P)$ -уровней атома водорода. В этом случае: а) невозмущенный гамильтониан $\mathcal{H}_0$ вырожден, б) возмущение факторизовано, $\mathcal{H}' = V(x) \cos \omega t$, в) можно выбрать собственные состояния $\mathcal{H}_0$ и $V(x)$ одновременно, г) в результате КЭС также факторизуются, т. е. имеют вид $\varphi(x) f(t)$, где, однако, $f(t)$ — не гармоническая функция:

$$f \sim \exp(-i\gamma\omega \int \cos \omega t dt). \quad (24)$$

Очевидно, условие нетривиальности результата есть $\gamma \gtrsim 1$. Безразмерный критерий γ равен в данном случае

$$\gamma = M_{2S,2P} / \hbar\omega = \sqrt{3} ea_0 E / \hbar\omega, \quad (25)$$

где M — матричный элемент перехода в поле E , a_0 — боровский радиус ($a_0 = \hbar^2/me^2$).

Условие $\gamma = 1$ даст амплитуду поля $E = me\omega/\hbar/\sqrt{3}$. Найдем соответствующую мощность идеально фокусированного лазерного луча. Зададимся площадью фокусного пятна λ^2 , где λ — длина волны; получим

$$W = E^2 \lambda^2 c / 8\pi = (\pi/6) mc^2 (mc^2/\hbar) e^2 / \hbar c = 2 \cdot 10^{12} \text{ эрг/сек} = 2 \cdot 10^5 \text{ вт}.$$

Эта величина может считаться весьма скромной по сравнению с достигнутыми в настоящее время мощностями. Надо иметь в виду, однако, что она относится к фокусированному лучу. Спектроскопические опыты требуют поля, заполняющего достаточный объем. Однако рассмотрение экспериментальных устройств не входит в задачи статьи.

Если мы имеем дело с поворотом электронного спина, то матричный элемент взаимодействия равен $M = \mu H$: он меньше, чем в предыдущем случае, в $(\hbar c/e^2) \sqrt{3} \approx 240$ раз. Соответственно получится в $6 \cdot 10^4$ раз большая необходимая мощность, $\sim 10^{10}$ вт. Осуществление опытов с такой мощностью является трудной задачей.

Наконец, типичным является возбуждение невырожденного состояния излучением, близким к резонансу. В этом случае нельзя ограничиться первым членом ряда теории возмущений, когда

$$\gamma' \sim M/\hbar |\omega - \omega_0| \sim 1. \quad (26)$$

Для разрешенного перехода $M \sim ea_0 E$, и условие $\gamma' = 1$ дает мощность луча с площадью поперечного сечения S :

$$W_S = 6 \cdot 10^5 (S/\lambda^2) |(\omega - \omega_0)/\omega|^2 \text{ вт}. \quad (27)$$

8. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Необходимо подчеркнуть, что большая часть результатов была получена ранее другими методами. Ниже отмечены соответствующие работы и результаты. Однако метод квазиэнергии, развиваемый выше, представляется наиболее адекватным и экономным даже там, где результаты

известны. Новый способ получения этих результатов представляет методический интерес.

Задача данной методической статьи — показ на простейшем примере способа действий с квазиэнергией и удобства этого понятия, особенно в простейшем резонансном случае. Изложенные простые методы могут быть полезны в задачах, связанных с астрофизическим мазерным излучением, и в теории просветления разреженных сред (ср. заметку¹⁵). Автором не ставилась цель полного обзора всей литературы. По более сложным вопросам ограничимся указанием литературы^{10,13,16,17}. Вкратце остановимся лишь на принципиальном вопросе: всегда ли существуют состояния с определенной вещественной квазиэнергией для системы, находящейся в периодическом поле?

Всякое воздействие на квантовомеханическую систему можно рассматривать как унитарный оператор. Рассматриваем воздействие в течение одного периода. Квазиэнергия есть результат диагонализации оператора однопериодного воздействия. В конечномерной системе (например, двухуровневой) диагонализация всегда возможна. Унитарность оператора обеспечивает вещественность квазиэнергии. Однако в бесконечномерной системе диагонализация возможна не всегда. Переломов и Попов (см. ¹⁷) построили интересный пример, рассматривая гармонический осциллятор с частотой ω_0 и возмущение вида $Vx^2 \cos \omega t$. При значениях ω , близких к параметрическому резонансу ($\omega \approx 2\omega_0$), при любом начальном состоянии происходит неограниченный рост энергии осциллятора, а значит, нет повторяющихся с периодом $2\pi/\omega$ КЭС.

Таким образом, само существование квазиэнергий является нетривиальным. В реальных системах понятие квазиэнергии является приближенным, оно существует постольку, поскольку можно пренебречь многофотонной ионизацией. Однако не надо бояться приближенности с момента, когда характер приближения понят. Здесь уместно сослаться на замечательную статью Фока¹⁸ о роли приближенных решений в физике.

Институт прикладной математики
АН СССР

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- $\hbar \equiv 1$ — постоянная Планка;
- $\mathcal{H}_0$ — гамильтониан, не зависящий от времени;
- $\mathcal{H}(t)$ — гамильтониан, периодически зависящий от времени;
- $\mathcal{H}'(t)$ — зависящая от времени часть $\mathcal{H}(t)$, $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'(t)$;
- α — параметр включения возмущения, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \alpha \mathcal{H}'$, $0 \leq \alpha \leq 1$;
- T — период, $\mathcal{H}(t+T) \equiv \mathcal{H}(t)$;
- ω — круговая частота $\mathcal{H}(t)$ и $\mathcal{H}'(t)$, так что $\omega = 2\pi/T$;
- E_k — энергия k -го собственного значения $\mathcal{H}_0$;
- $\varphi_k(x)$ — соответствующая собственная функция, $\mathcal{H}_0 \varphi_k = E_k \varphi_k$;
- $\varphi_k(x) e^{-iE_k t}$ — решение уравнения Шрёдингера для $\mathcal{H}_0$;
- F_k — квазиэнергия k -го квазиэнергетического состояния $\mathcal{H}(t)$;
- $\psi_k(x, t) = \varphi_k(x, t) e^{-iF_k t}$ — решение уравнения Шрёдингера для $\mathcal{H}(t)$;
- $\varphi_k(x, t)$ — соответствующая собственная функция, $\varphi_k(x, t+T) \equiv \varphi_k(x, t)$;
- $F_{kp} = F_k + p\omega$ — спутники квазиэнергии k -го состояния, p — целое (положительное, отрицательное или 0);
- $\omega' = \omega_{knr} = F_{kp} - F_{nq}$ — частота перехода из k -го в n -е состояние квазиэнергии за счет спутников kp и nq , $p-q=r$;
- $\omega' = F_k - F_n + r\omega > 0$ — условие спонтанного излучения, $\omega' > 0$;
- N_k — концентрация частиц в k -м состоянии, см^{-3} ;
- $N_k > N_n$ — условие инверсии на частотах $\omega' = \omega_{knr}$ для всех r таких, что $\omega' > 0$.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С. Г. Раутман, И. И. Собельман, ЖЭТФ **41**, 456 (1961); **44**, 934 (1963); Т. И. Кузнецова, С. Г. Раутман, ЖЭТФ **49**, 1605 (1965).
 2. P. W. Langhoff, S. T. Epstein, M. Karplus, Rev. Mod. Phys. **44**, 602 (1972).
 3. А. И. Никишов, В. И. Ритус, ЖЭТФ **46**, 776 (1964).
 4. В. И. Ритус, ЖЭТФ **51**, 1544 (1966).
 5. Я. Б. Зельдович, *ibid.*, стр. 1492.
 6. J. N. Shirley, Phys. Rev. **B138**, 979 (1965).
 7. R. H. Young, W. J. Deal, Jr., N. R. Kestner, Mol. Phys. **17**, 369 (1969).
 8. В. П. Олейник, ЖЭТФ **52**, 1049; **53**, 1997 (1967).
 9. R. Porular, C.R. Ac. Sci. **B265**, 595 (1967).
 10. В. А. Коварский, Н. Ф. Перельман, ЖЭТФ **60**, 509; **61**, 1389 (1971); ФТТ **13**, 1888 (1971).
 11. В. А. Коварский, ЖЭТФ **57**, 1217 (1969).
 12. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1964).
 13. R. Karplus, J. Schwinger, Phys. Rev. **73**, 1020 (1948); Н. Г. Басов, А. М. Прохоров, УФН **57**, 485 (1955); A. Javan, Phys. Rev. **107**, 1579 (1970).
 14. В. А. Коварский, Н. Ф. Перельман, ЖЭТФ **61**, 1389 (1971); **63**, 831 (1972).
 15. Д. А. Варшавович, УФН **101**, 369 (1970).
 16. М. Н. Адамов, М. Д. Бальмаков, Вестн. ЛГУ (Физика, химия), № 4, 83 (1971); № 1, 29 (1972).
 17. А. М. Переломов, В. С. Попов, ЖЭТФ **57**, 1684 (1969); А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, 2-е изд., М., «Наука», 1971.
 18. В. А. Фок, УФН **16**, 1070 (1936).
-