

Ю. Н. ЕЛДЫШЕВ

### ВЫНУЖДЕННЫЙ СДВИГ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ И ПЕРЕНОРМИРОВКА ЭНЕРГИИ

В настоящей работе используется метод перенормировки энергии в представлении Фарри для рассмотрения взаимодействия атомных электронов с налетающими фотонами (штарк — эффект в переменном поле [1]). Специфический вынужденный сдвиг энергетических уровней, являющийся результатом этого взаимодействия, исследуется сначала с помощью полуклассической модели Велтона [2], а затем в рамках квантовой электродинамики на примере двухуровневой модели.

#### Полуклассическое рассмотрение

Прежде всего попытаемся пояснить наличие дополнительного сдвига с помощью метода, предложенного Велтоном с целью дать наглядную интерпретацию бетевским результатам на основе анализа взаимодействия электрона с нулевыми колебаниями электромагнитного поля.

Электрон, находящийся в потенциальном поле  $V(\vec{r})$  и обладающий определенным энергетическим спектром  $E_n$ , в результате поглощения и испускания виртуальных квантов флуктуирует. Следствием этого является эффективное смещение электрона по склону потенциальной ямы, что и обуславливает сдвиг энергетических уровней.

Велтоном был рассмотрен случай, когда число реальных фотонов в системе равнялось нулю — бетевский сдвиг уровней возникает из-за взаимодействия электрона с электромагнитным вакуумом. Если же в рассматриваемой системе имеются реальные (внешние) фотоны, то к вакуумным флуктуациям электрона добавляются его смещения, вызванные взаимодействием электрона с этими фотонами.

Мы покажем это, воспользовавшись велтоновским расчетом, предполагая, что в начальном состоянии присутствует один реальный фотон, т. е.  $|\psi\rangle = a_0^+ |0\rangle$ .

В нерелятивистском случае (который мы и рассматриваем) смещение электрона, взаимодействующего с квантованным полем фотонов и свободного во всех других отношениях, описывается уравнением

$$m\Delta\vec{r} = e\vec{\varepsilon}, \quad (1)$$

где

$$\vec{\varepsilon} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A},$$

а для векторного потенциала мы пользуемся вторично проквантованным выражением

$$\vec{A} = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{k,\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k}} (a_{k\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - ikt} + a_{k\lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r} + ikt}) \vec{e}_{\lambda}.$$

Решая уравнение (1) в дипольном приближении и проводя усреднение, найдем среднее квадратичное смещение электрона

$$\langle (\vec{\Delta r})^2 \rangle = \frac{\langle \Psi | (\vec{\Delta r})^2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi^+ | \Psi \rangle} = \frac{4\pi\hbar e^2}{m^2 L^3} \left( \sum_k \frac{1}{\omega^3} + \frac{1}{\omega_0^3} \right). \quad (2)$$

(здесь  $\omega_0$  — частота внешнего фотона).

Формула (2) состоит из двух частей, первая из которых описывает отклонение электрона за счет взаимодействия его с вакуумными фотонами и после замены суммирования по  $k$  интегрированием по частотам может быть переписана обычным образом

$$\langle (\vec{\Delta r})^2 \rangle_{\text{бет}} = \frac{2}{\pi} \alpha \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{d\omega}{\omega}.$$

Второе же слагаемое в (2) как раз и соответствует дополнительному смещению электрона в результате его взаимодействия с реальным фотоном и, будучи выражено через среднюю плотность энергии электромагнитного поля

$$\langle W \rangle = \frac{1}{4\pi} \frac{\langle \Psi^+ | (\vec{\varepsilon})^2 | \Psi \rangle}{\langle \Psi^+ | \Psi \rangle},$$

принимает вид

$$(\vec{\Delta r})_{\text{вынужд.}}^2 = 4\pi \frac{e^2}{m^2} \frac{\langle W \rangle}{\omega_0^4}.$$

Это изменение средней квадратичной флуктуации координат электрона по сравнению со случаем вакуумных векторов состояния должно сказаться на ряде эффектов. В частности, вычисляя поправку к энергии стационарного состояния электрона в атоме, мы получим дополнительно к известному выражению Бете член, обязанный своим происхождением наличию в начальном состоянии реального фотона.

В рамках полуклассической картины сдвиг уровней энергии стационарного состояния электрона в силовом поле  $V(\vec{r})$  может быть вычислен по формуле

$$\Delta E = \frac{\langle \Psi^+ | \int d^3x \psi^+ \{ V(\vec{x} + \vec{\Delta x}) - V(\vec{x}) \} \psi | \Psi \rangle}{\langle \Psi^+ | \Psi \rangle}.$$

Переставляя коммутирующие операторы и производя усреднение, получаем

$$\Delta E = \frac{1}{6} \int d^3x \psi^+ \psi \langle (\vec{\Delta x})^2 \rangle \nabla^2 V(\vec{x}).$$

Ввиду того что  $\langle (\Delta \vec{x})^2 \rangle$  распадается на два слагаемых,  $\Delta E$  также состоит из двух частей, первая из которых соответствует вакуумному сдвигу, а вторая описывает смещение энергетических уровней за счет вынужденных переходов.

Если рассматривать электрон, находящийся в атоме водорода, т. е. принять  $V = -e^2/r$ , то этот дополнительный сдвиг оказывается равным

$$\Delta E_{\text{вынужд}} = \frac{8\pi^2}{3} \left( \frac{e^2}{m} \right)^2 |\psi(0)|^2 \frac{\langle W \rangle}{\omega_0^4}.$$

Приведенные полуклассические соображения лишены строгости и должны в значительной мере рассматриваться лишь как наводящие. Однако они в существенных чертах подтверждаются более последовательным квантово-электродинамическим расчетом.

### Аппарат квантовой теории

Уравнение для вектора состояния указанной системы в представлении Шредингера имеет вид [3]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_s = H |\Psi\rangle_s \equiv (H_1 + H_2) |\Psi\rangle_s.$$

Здесь  $H_1$  включает в себя энергию свободного электрона и энергию взаимодействия с внешним (классическим) полем, конкретный вид которого мы не будем задавать в этой работе, но считаем его известным;  $H_2$  представляет собой перенормированную энергию взаимодействия электрона с вторично проквантованным полем фотона

$$H_2 = H_{\text{int}} - \hat{\Delta} E.$$

Подчеркнем, что, поскольку мы рассматриваем связанные состояния, перенормируется не масса, а энергия. Осуществим переход к представлению Фарри, в котором электронные состояния являются собственными состояниями гамильтониана, включающего взаимодействие с классическим полем, но не включающего взаимодействие с полем фотонов. Уравнение для  $S$ -матрицы в этом представлении имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = \hat{H}(t) S(t, t_0) \quad (3)$$

(все величины в представлении Фарри мы записываем без индекса, ибо это не может вызвать недоразумений).

Здесь  $\hat{H}(t)$  — перенормированный гамильтониан взаимодействия электрона с квантованным полем фотона в представлении Фарри.

Используя прием описания с помощью  $C$ -численных амплитуд вероятностей<sup>1</sup>  $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \Psi_n C_n(t)$ , (где  $\{\Psi_n\}$  — полная система ортонормированных векторов состояния в отсутствие взаимодействия электронов с фотонами, рассматриваемого как возмущение  $\partial/\partial t |\Psi_n\rangle > 0$ ) и выполняя несложные преобразования, получим удобную для применения формулу, выведенную в [3]:

$$C_n(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \frac{\langle \Psi_n^+(t_0) | \hat{H}(t') S(t', t_0) | \Psi_n(t_0) \rangle}{\langle \Psi_n^+(t_0) | S(t', t_0) | \Psi_n(t_0) \rangle} \right\}.$$

<sup>1</sup> Квантовые числа, характеризующие состояния, обозначаем одной буквой  $n$ .

Сдвиг и ширина уровня  $E_n$  могут быть найдены соответственно как вещественная и мнимая части выражения

$$\lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow \infty}} \frac{1}{\hbar} \frac{\langle \Psi_n^+ | \hat{H}(t) S(t, t_0) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n^+ | S(t, t_0) | \Psi_n \rangle}. \quad (4)$$

Полученные формулы являются точными, ибо нигде не использовалась теория возмущений. Однако при анализе выражения (4) и вычислении «контрчленов» мы воспользуемся разложением  $S$ -матрицы в ряд по степеням постоянной тонкой структуры  $\alpha = e^2/\hbar c$ .

### Сдвиг в двухуровневой модели

В настоящей статье мы рассмотрим модель атома с двумя возмущенными состояниями  $E_1$  и  $E_2$  (причем  $E_1 < E_2$ ) — модель, используемую, например, Гайтлером [4], и воспользуемся для  $\hat{H}$  выражением [5]

$$\hat{H}(t) = \int d^3x \Psi^+ \left( -\frac{e}{mc} \vec{P} \vec{A} - \Delta \hat{E} \right) \Psi. \quad (5)$$

Чтобы выбрать должным образом «контрчлен»  $\hat{\Delta E}$ , представим  $S$ -матрицу, удовлетворяющую уравнению (3), в виде разложения

$$S(t, t_0) = \sum_{i,j,m,n} S^{(i,j,m,n)}(t, t_0). \quad (6)$$

Такое разбиение на сумму нормальных произведений соответствует рассмотрению частных, т. е. относящихся к различным физическим процессам, матриц переходов (индексы  $i, m$  указывают, сколько в данном нормальном произведении содержится операторов поглощения бозонов и фермионов, а  $j, n$  — число соответствующих операторов рождения).

Подставляя (6) в (3), получим бесконечную систему уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S^{(i,j,m,n)} = & H^{(+)} \{ S^{(i,j-1,m-1,n-1)} + S^{(i,j-1,m,n)} \} + \\ & + H^{(-)} \{ S^{(i-1,j,m-1,n-1)} + S^{(i-1,j,m,n)} + S^{(i,j+1,m-1,n-1)} + S^{(i,j+1,m,n)} \} - \\ & - H^{(0)} \{ S^{(i,j,m-1,n-1)} + S^{(i,j,m,n)} \} \end{aligned} \quad (7)$$

(индексы внизу указывают число фотонных сверток).

Здесь  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$  — части оператора (5), соответственно увеличивающие и уменьшающие на единицу число фотонов в системе;  $H^{(0)}$  — оставляет число фотонов без изменения. Из того, что в начальном и конечном состояниях присутствует по одному электрону (поскольку в нерелятивистской теории число электронов не может измениться, во всех промежуточных состояниях также имеется по одному электрону), следует, что в системе (7) должны быть рассмотрены лишь члены с  $m, n \leq 1$ .

Для рассматриваемой модели атома с двумя состояниями ( $|\Psi_1\rangle$  энергией  $E_1$  и  $|\Psi_2\rangle$  с энергией  $E_2$ ) условие, определяющее «контрчлен»  $\Delta E$ , запишется следующим образом:

$$\langle \Psi_1^+ | S^{(0,0,1,1)} | \Psi_1 \rangle = 0. \quad (8)$$

Физический смысл и целесообразность этого условия станут ясными несколько позже.

Система (7) может быть переписана в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S^{(i, j, 1, 1)} = H^{(+)} S^{(i, j-1, 1, 1)} + H^{(-)} \{ S^{(i-1, j, 1, 1)} + S_1^{(i, j+1, 1, 1)} \} - \\ - H^{(0)} \{ S^{(i, j, 0, 0)} + S^{(i, j, 1, 1)} \}$$

или (если придавать  $i, j$  последовательно значения 0,1 и т. д., т. е. рассматривать процессы с различным числом фотонов) в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S^{(0, 0, 1, 1)} = H^{(-)} S^{(0, 1, 1, 1)} - H^{(0)} - H^{(0)} S^{(0, 0, 1, 1)}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S^{(0, 1, 1, 1)} = H^{(+)} S^{(0, 0, 1, 1)} - H^{(-)} S_1^{(0, 2, 1, 1)} - H^{(0)} S^{(0, 1, 1, 1)}, \quad (9) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S^{(0, 2, 1, 1)} = H^{(+)} S^{(0, 1, 1, 1)} + H^{(-)} S_1^{(0, 3, 1, 1)} - H^{(0)} S^{(0, 2, 1, 1)}$$

и т. д.

Систему (9) удобно представить графически (см. рис. 1).

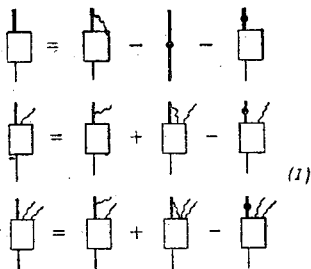


Рис. 1

(Смысл символических обозначений такой же, как обычно. «Точка» соответствует «контрчлену»).

Систему (I) будем решать методом последовательных приближе-

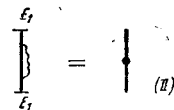


Рис. 2

ний. В нижнем (дающем основной вклад в результаты) порядке по возмущению приходим к условию (см. рис. 2).

После несложных вычислений можем представить «полевую энергию» в аналитическом виде

$$\Delta E = - \frac{2}{3\pi} \frac{\alpha}{(mc)^2} |P_{12}|^2 \left\{ mc^2 - (E_2 - E_1) \ln \frac{mc^2}{E_2 - E_1} \right\},$$

где  $P_{12}$  — матричный элемент оператора импульса.

Из (II) и (8) следует, что выбранное условие перенормировки, заключающееся в переопределении энергии основного состояния, приводит к тому, что для уровня  $E_1$  в данном порядке будет отсутствовать не только ширина, но и бетевский сдвиг. Сдвиг же, обусловленный вынужденными переходами из-за взаимодействия с налетающим фотоном, равен

$$\delta E_1 = - 2\pi \left( \frac{e\hbar}{m} \right)^2 |\vec{P} \vec{e}_0|_{12}^2 \frac{\langle W \rangle}{\mathcal{E}_0^2 (E_2 - E_1 - \mathcal{E}_0)} \quad (10)$$

( $\vec{e}_0$  — вектор, указывающий состояние поляризации фотона,  $\mathcal{E}_0$  — его энергия).

Таким образом, при выбранном условии перенормировки основной уровень смещается только за счет взаимодействия с внешними фотонами.

Для уровня  $E_2$  сдвиг в результате взаимодействия с реальным фотоном оказывается равным

$$\delta E_2 = -\delta E_1, \quad (11)$$

т. е. в результате вынужденных переходов в системе уровни как бы раздвигаются (либо, наоборот, сдвигаются). Для уровня  $E_2$  наряду с «вынужденным» имеет место бетевский сдвиг

$$\Delta E_2 = -\frac{4}{3\pi} \frac{\alpha}{(mc)^2} |P_{12}|^2 (E_2 - E_1) \ln \frac{mc^2}{E_2 - E_1}. \quad (12)$$

Мы не будем анализировать поправки высших порядков к ширине и сдвигу уровней, так как они не вносят существенных изменений в полученные формулы.

Сопоставляя (10), (11) и (12), получим

$$D = \frac{\delta E_2}{\Delta E_2} = \frac{3\pi (\hbar c)^3}{2} \frac{\langle W \rangle}{\mathcal{E}_0^2 (E_2 - E_1) [(E_2 - E_1) - \mathcal{E}_0] \ln \frac{mc^2}{E_2 - E_1}}. \quad (13)$$

Выражение (13) дает отношение «вынужденного» сдвига к бетевскому, вычисленному в этой же модели.

Видно, что это отношение имеет характерный «резонансный всплеск», когда энергия налетающего фотона близка к разности уровней (при  $\mathcal{E}_0 = E_2 - E_1$  величину  $E_2 - E_1 - \mathcal{E}_0$ , как и обычно, следует заменить шириной линии  $\Gamma$ ).

В заключение приведем полуколичественную оценку формулы (13). При  $\mathcal{E}_0$  и  $E_2 - E_1$  в области 1–10 эв и  $\Gamma = 10^{-8} - 10^{-9}$  эв «вынужденный» сдвиг будет порядка бетевского, если  $\langle W \rangle = 10^6$  эв/см<sup>3</sup>.

Отметим, что указанный метод применим к любым связанным системам.

Выражаю благодарность В. И. Григорьеву за многочисленные ценные указания.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л., Ходовой. «Успехи физич. наук», 93, вып. 1, 71, 1967.
2. Welton Th. Phys. Rev., 74, 1157, 1948.
3. Григорьев В. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астроном., № 4, 56, 1964.
4. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М., ИЛ, 1956.
5. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М., ИЛ, 1963.

Поступила в редакцию  
12.4 1968 г.

Кафедра  
квантовой теории