Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 6 — 1969

УДК 530.145:517.933

Ж. ЛОШАК, С. Ф. ШУШУРИН

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СДВИГА УРОВНЕЙ АТОМОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МОЩНОГО ПУЧКА СВЕТА

Расчет экспериментально наблюдаемых сдвигов энергетических уровней атомов под действием переменных электромагнитных полей на основе метода вариации постоянных Дирака во втором приближении теории возмущений приводит к появлению расходящихся секулярных членов. Для их устранения используется метод усреднения Крылова—Боголюбова. Подробно рассмотрен случай сдвига уровней под действием мощного пучка некогерентного света. Использована модель некогерентного света, предложенная ранее для исследования некоторых вопросов дифракции.

§ 1. Сдвиги энергетических уровней в переменных полях

Сдвиги энергетических уровней под действием внешних полей, проявляющиеся в сдвиге резонансных линий, изучаются в физике давно. В 1940 г. Ф. Блохом и А. Зигертом был предсказан сдвиг резонансного значения амплитуды эллиптически (в частном случае, линейно) поляризованного слабого переменного поля, перпендикулярного к постоянному сильному магнитному полю [1].

В 1959—1962 гг. группа французских физиков, изучая процесс оптической накачки, обнаружила и исследовала (экспериментально и теоретически на основе квантовой теории поля) сдвиги зеемановских подуровней некоторых атомов (преимущественно, ртути) под действием переменного магнитного поля [2]. Обзор этих исследований сделан в [3]. Единственным экспериментальным исследованием сдвига энергетических уровней атома является работа [4], в которой проведена оценка смещения резонансного дублета калия, соответствующего переходу $4s_{1/2} — 4p_{1/2,\,3/2}$ под действием мощного импульса рубинового лазера. Наблюдается сдвиг порядка полуширины спектральной линии ($3 \cdot 10^9$ *гц*).

В связи с бурным развитием экспериментальных исследований взаимодействия мощных пучков излучения с веществом интересно теоретически выяснить вопрос о возможности сдвига электронных уровней атомов под действием мощных пучков как когерентного, так и некогерентного излучения. Пользуясь методами квантовой электродинамики, можно провести расчет, аналогичный выполненному в [2]. Однако интересно выяснить, не является ли этот эффект более простым по своей природе и нельзя ли его предвычислить в рамках нерелятивистской квантовой механики и теории Дирака, так как расчетная схема в этом случае гораздо проще, чем в квантовой теории поля.

§ 2. Метод Дирака и нелинейная механика

В начале развития квантовой механики П. А. М. Дирак предложил метод расчета взаимодействия излучения и вещества — квантовую теорию испускания и поглощения излучения. Этот метод представляет собой вариант теории возмущений и получил название «метод вариации постоянных» [5]. Этот метод вскоре использовала М. Гепперт-Майер для расчета вероятности процесса расщепления энергии возбужденного атома на два фотона (а также обратного процесса — поглощения атомом двух фотонов, т. е. такого, при котором энергия верхнего уровня превышает энергию конечного уровня на сумму энергий двух фотонов). Этот расчет приобретает актуальность в связи с обнаружением удвоения частоты фотонов лазерного пучка в некоторых кристаллах (см., например, [7]).

Этот метод состоит в преобразовании искомых волновых функций, что сводит волновое уравнение к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Дальнейшая задача состоит в решении этой системы. Свое название метод получил потому, что для решения автор использовал предложенный Л. Лагранжем и развитый С. Д. Пуассоном «метод вариации постоянных», ставший одной из фундаментальных частей теории возмущений небесной механики [8].

Метод Дирака прекрасно сходится, если пренебречь членами второго порядка относительно некоторого малого параметра в правой части. Первое приближение метода Дирака позволяет рассчитывать ряд известных эффектов: рассеяние света, дисперсию, комбинационное рассеяние [9]. Но сдвиг уровней происходит под действием сугубо интенсивного излучения и является, вне сомнения, эффектом второго порядка, хотя бы потому, что он в среднем по времени не равен нулю. Метод же Дирака во втором приближении приводит к возникновению секулярных членов. Н. Блумберген с сотрудниками вычислил второе приближение в полуклассической теории О. Клейна для усреднения взаимодействия света с нелинейным диэлектриком [10]. В это приближение входят секулярные члены, которые отбрасываются, а вернее, как показал Ж. Лошак, их можно обоснованно устранить.

Для устранения секулярных членов во втором приближении метода вариации постоянных Дирака можно воспользоваться известным методом, разработанным Н. М. Крыловым и Н. Н. Боголюбовым (методом усреднения) [11]. Это показано в [12, 13, 14] для случая решения уравнений квантовой механики методом теории возмущений: уравнения Шредингера и уравнения Дирака. В [14] содержится обзор предшествующих работ с подробным изложением метода средних и его приложения к решению квантово-механических задач. Упомянутые выше работы посвящены расчету сдвига энергетических уровней атома под действием одного фотона (одной монохроматической волны). Расчет сдвига уровней под действием когерентных волн совпадает с расчетом сдвига под действием одной волны и является частным случаем расчета сдвига под действием некогерентного излучения. Поэтому ниже будет вычислен сдвиг уровней атома под действием некогерентного излучения, для которого предложена соответствующая модель. При этом будут воспроизведены основные моменты применения метода усреднения в квантовой механике, изложенные в [14].

Все упомянутые расчеты не доведены до конкретных числовых результатов, отчасти из-за сложности нахождения собственных чисел матрицы, отчасти из-за недостатка точных экспериментальных данных об этом сдвиге. Кроме того, если облучение атома производится светом с частотой, соответствующей одному из его переходов, характер зависимости сдвига от частоты значительно усложняется. Явление приобретает черты, присущие аномальной дисперсии, которая значительно сложнее нормальной. Поэтому следующий расчет применим только к случаю облучения светом, частота которого сильно отличается от частоты переходного атома.

§ 3. Описание некогерентного света

Для расчета сдвига уровней под действием пучка некогерентного света прежде всего необходимо найти способ описания этого возмущения. В работах [12, 13, 14] вычислялся сдвиг под действием единичного фотона, который описывался плоской монохроматической волной, начальная фаза которого условно принята равной нулю. Мы рассмотрим случай совокупного действия последовательности волн на один и тот же атом в различные моменты времени. Если моменты произвольны, то это будет соответствовать действию волн, принадлежащих некогерентному пучку. Можно предположить, что частично или полностью когерентному пучку будет соответствовать статистическая или детерминированная связь между моментами действия различных волн на атом.

Вопрос о согласовании вечного существования монохроматических волн и дискретного характера актов испускания является весьма сложным. Поэтому обратимся к традиционным способам описания фотонов как волновых пакетов. Известны два типа волновых пакетов: прямоугольный и экспоненциально затухающий. Преимуществом последнего является более простой вид его фурье-изображения. Это было отмечено М. Франсоном, который использовал последовательность затухающих цугов волн для описания излучения атомами когерентного света [15].

Пусть атом находится в начале координат, а из бесконечности к нему идет последовательность цугов. От начального момента до некоторого τ_1 никакого действия на атом не производится; в τ_1 начинает действие первый цуг, в τ_1 — второй и т. д., но действие каждого цуга длится до бесконечности, хотя амплитуда каждого цуга экспоненциально уменьшается со временем.

Тогда, несколько обобщая вид обычного волнового возмущения, представим возмущение, зависящее от времени, в виде

$$S(t) = -e \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \frac{a_j}{|\vec{a}_j|} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\lambda(t-\tau_m)} \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r} + \varphi_m)\, Y(t-\tau_m), \tag{1}$$

где e — заряд электрона, α_j — матрицы Дирака, $\vec{a}_j$ — амплитуда плоской волны, λ — некоторый параметр, характеризующий затухание, τ_m — момент начала действия на атом m-ного цуга волн, $Y(x)$ — функция Хевисайда, равная нулю при отрицательных значениях и при нулевом значении аргумента, и единице — при положительных.

§ 4. Метод усреднения

Рассмотрим волновое уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}^0 \Psi + \varepsilon S(t)\,\Psi,$$

где $\hat{H}^0$ — дираковский оператор Гамильтона, а $S(t)$ определяется выражением (1). Пусть

$$\varphi_k^0 e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} \quad (k = 0, 1, 2, \ldots)$$

ортогональная система собственных функций этого гамильтониана (для простоты рассмотрим невырожденный случай, так как в [14] задача рассмотрена в самом общем виде). Волновая функция возмущенной системы запишется в виде

$$\Psi = \sum_k u_k(t)\, \varphi_k^0 e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}.$$

Тогда согласно [5] функции $u_k(t)$ будут удовлетворять бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{du_k}{dt} = \varepsilon U_k(t, u) = \varepsilon \sum_k S_{nk}^{(t)} u_{k'}, \tag{2}$$

где $S_{nk}(t)$ — элементы матрицы, определяемые:

$$S_{nk} = \int\limits_V \varphi_n^{0*} S(t)\, \varphi_k^0 dV. \tag{3}$$

Введем обозначения:

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}, \quad J_{nk} = J_{nk}^{\pm} = \frac{e}{2\hbar} \int\limits_V \varphi_n^{0*} \frac{\vec{\alpha}\vec{a}}{|\vec{a}|} e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \varphi_k dV. \tag{4}$$

Из (1), (3) и (4) получим

$$S_{nk} = iJ_{nkj} \sum_{m=1}^{\infty} \left[e^{i(\omega_{nk}+\omega)t + i\varphi_m} + e^{i(\omega_{nk}-\omega)t - i\varphi_m} \right] e^{-\lambda(t-\tau_m)}\, Y(t - \tau_m).$$

Применим методы средних к решению уравнений (2) в первом и втором приближениях.

Приведем основные этапы метода средних. Пусть имеется система уравнений

$$\frac{du_j}{dt} = \varepsilon U_j(t, u), \tag{5}$$

где u — множество $\{u_j\}$ или какое-либо его подмножество.

Предположим, что временные средние правых частей системы конечны

$$\overline{U}_j^t = \underset{t}{M}\{U\} = \lim_{T\to\infty} \int\limits_0^T U(\vartheta, u)\, d\vartheta = U_{0j}(u)$$

и введем следующие величины:

$$\widetilde{U}_j(t, u) = \int\limits_0^t U_j(\vartheta, u)\, d\vartheta - U_{0j}(u), \quad \widetilde{\widetilde{U}}_j(t, u) = \int\limits_0^t \widetilde{U}_j(\vartheta, u)\, d\vartheta.$$

Произведем в системе (5) замену переменных

$$u_j(t) = \gamma_j + \varepsilon \widetilde{U}_j(t, \gamma), \tag{6}$$

где γ — множество $\{\gamma_j\}$ или какое-либо его подмножество.

При обосновании метода усреднения без каких-либо предположений о характере осцилляций функций $U_j(t, u)$ доказывается, что функции γ_j удовлетворяют системе

$$\frac{d\gamma_j}{dt} = \varepsilon \underset{t}{M}\{U_j(t, \gamma)\} + \text{члены, пропорциональные } \varepsilon^2. \tag{7}$$

Далее, если произвести замену переменных

$$u_j(t) = \bar{\gamma}_j + \varepsilon \widetilde{U}_j(t, \bar{\gamma}) + \varepsilon^2 \sum_k \frac{\partial U_j(t, \bar{\gamma})}{\partial \bar{\gamma}_k} U(t, \gamma) -$$

$$- \varepsilon^2 \sum_k \frac{\partial \widetilde{\widetilde{U}}_j(t, \gamma)}{\partial \bar{\gamma}_k} \underset{t}{M}\{U_k(t, \bar{\gamma})\}, \tag{8}$$

где $\bar{\gamma}$ — множество $\{\bar{\gamma}_j\}$ или какое-либо его подмножество, то функции γ удовлетворяют системе

$$\frac{d\bar{\gamma}_j}{dt} = \varepsilon \underset{t}{M}\{U_j(t, \gamma\}) +$$

$$+ \varepsilon^2 \underset{t}{M}\left\{\sum_k \frac{\partial U_j(t, \bar{\gamma})}{\partial \bar{\gamma}_k} \widetilde{U}(t, \gamma)\right\} + \text{члены пропорциональные } \varepsilon^3. \tag{9}$$

Выражения (6) и (8) представляют собой первое и второе приближения, а функции γ и $\bar{\gamma}$, которые в них входят, являются соответственно решениями систем (7) и (9), взятых с точностью до членов высшего порядка по ε (явно зависящими от времени).

В применении к (2) выражение (6) примет вид

$$u_n = \gamma_n + \varepsilon \sum_k \widetilde{S}_{nk} \gamma_k, \tag{6'}$$

где

$$\widetilde{S}_{nk} = iJ_{nk}\left[\frac{e^{[-\lambda + i(\omega_{nk}+\omega)]t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}+\omega)} + \frac{e^{[-\lambda + i(\omega_{nk}-\omega)t]}}{-\lambda + i(\omega_{nk}-\omega)}\right] \sum_{m=1}^{\infty} e^{(\lambda\tau_m + i\varphi_m)} Y(t - \tau_m) =$$

$$= iJ_{nk}\left[\frac{e^{i(\omega_{nk}+\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_{nk}-\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}-\omega)}\right] \times \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\lambda(t-\tau_m) + i\varphi_m} Y(t - \tau_m).$$

Используя выражения (29)—(34) работы [14], получим для второго приближения следующее выражение:

$$u_n = \bar{\gamma}_n + \varepsilon \widetilde{U}(t, \bar{\gamma}) + \varepsilon^2 \widetilde{W}(t, \bar{\gamma}),$$

где

$$W_n(t, \bar{\gamma}) = \sum_l \frac{\partial U_n(t, \bar{\gamma})}{\partial \bar{\gamma} l} \widetilde{U}_l(t, \gamma).$$

Функции $\bar{\gamma}$ будут решениями уравнений

$$\frac{d\bar{\gamma}_n}{dt} = \varepsilon^2 \underset{t}{M} \{W_n(t, \bar{\gamma})\},$$

где

$$W_n(t, \bar{\gamma}) = e^{-\lambda t} z(\lambda, \tau_m, \varphi_m) \sum_{kl} \gamma_k J_{nl} J_{lk} \left[\frac{e^{i(\omega_{nk}+2\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{lk}+\omega)} + \right.$$

$$\left. + \frac{e^{i(\omega_{nk}+2\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{lk}-\omega)} + \frac{e^{i\omega_{nk}t}}{-\lambda + i(\omega_{ln}-\omega)} + \frac{e^{i\omega_{nk}t}}{-\lambda + i(\omega_{lk}+\omega)} \right], \tag{10}$$

а

$$z(\lambda, \tau_m, \varphi_m) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{(\lambda\tau_m + i\varphi_m)} Y(t - \tau_m)$$

некоторая константа, характеризующая некогерентный пучок света.

Окончательно второе приближение будет иметь вид

$$u_n = \gamma_n + \varepsilon \sum_k \gamma_k J_{nk} \left[\frac{e^{i(\omega_{nk}+\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_{nk}-\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}-\omega)} \right] z +$$

$$+ \varepsilon^2 \sum_{kl} \gamma_k J_{nl} J_{lk} \left[\frac{1}{-\lambda + i(\omega_{lk}+\omega)} \cdot \frac{e^{i(\omega_{nk}+2\omega)t}}{-\lambda + i(\omega_{nk}+2\omega)} + \right.$$

$$+ \frac{e^{i(\omega_{nk}-2\omega)}}{[-\lambda + i(\omega_{lk}-\omega)][-\lambda + i(\omega_{nk}-2\omega)]} + \frac{e^{i\omega_{nk}t}}{[-\lambda + i(\omega_{lk}-\omega)](-\lambda + i\omega_{nk})} +$$

$$\left. + \frac{e^{i\omega_{nk}t}}{[-\lambda + i(\omega_{lk}+\omega)](-\lambda + i\omega_{nk})} \right] z^2.$$

Полное решение можно записать в виде, совершенно аналогичном (41) работы [4]. Из него следует смещение энергетических уровней атома точно такое же, как в ранее рассматривавшихся случаях для одной волны.

Смещение уровней определяется как собственные числа матрицы, составленной из правой части уравнения (10) для функции $\bar{\gamma}$.

Нахождение собственных чисел в общем случае представляет собой очень сложную задачу. Можно решить ее лишь в каком-нибудь частном случае атомов некоторого сорта, если для них будет известно более или менее определенное экспериментальное значение смещения.

Итак, в настоящей работе показано, что при облучении атома последовательностью фотонов, рассматриваемых как монохроматические волны, будет иметь место сдвиг энергетических уровней атома. Этот результат справедлив как для последовательности волн, между фазами которых имеется какая-либо зависимость (когерентный или частично когерентный свет), так и для случая отсутствия какой-либо зависимости (некогерентный свет). Единственное ограничение, наложенное на расчет, состояло в требовании того, чтобы частота света, которым облучается атом, была бы далека от частоты переходов атома.

В заключение авторы выражают благодарность проф. Луи де Бройлю, по предложению которого были начаты исследования в этом направлении, за систематический интерес и плодотворные дискуссии. Авторы также благодарят д-ров Ж.-Л. Андраде э Сильва, М. Тьюнна и проф. С. Никитина за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bloch F., Siegert A. Phys. Rev., **57**, No. 6, 522—527, 1940.
2. Winter J. M. Ann. de Physique, **4**, No. 7—8, 745—812, 1959; Cohen-Tannudji C. Ann. de Physique, **7**, No. 7—8, 423—461, 9—10, 469—504, 1962.
3. Kastler A. J. Opt. Soc. Amer., **53**, No. 8, 905—910, 1963.
4. Александров Е. Б., Бонч-Бруевич А. М., Костин Н. Н., Ходовой В. А. Письма в ЖЭТФ, **3**, № 2, 85—88, 1966.
5. Dirac P. A. M. Proc. Phys. Soc. (L.), **114**, 243—265, 710—728, 1927; Френкель Я. И. Волновая механика, ч. II, ОНТИ, 1934, стр. 296.
6. Goeppert-Mayer M. Ann. Phys., **9**, Nr. 3, 273—294, 1931.
7. Franken P., Hill A. E., Peters C. W., Weinreich G. Phys. Rec. Lett., 7, 118—119, 1961.
8. Poisson S. D. J. Ecole Polytechn., Cah., **15**, 8, 1—56, Paris, 1809; Mem. Acad. Sc., t. 1, 1—70, 1818; **7**, 199—266, 1827; 13, 209—335, 1835; Traité de Mecanique, Bruxelles, 1838, 132—135.
9. De Broglie L. Le principe de correspondance et les interactions entre la matiére et la rayonnement. Paris, 1938, pp. 61—69.
10. Бломберген Н. Нелинейная оптика. М., «Мир», 1966, стр. 265—332.
11. Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н. Введение в нелинейную механику (приближенные и ассимптотические методы нелинейной механики). Киев. Изд. АН УССР, 1937; Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Ассимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., Физматгиз, 1958.
12. Lochak G. C. R. Acad. Sc. (Paris), **259**, 3183—3186, 1964.
13. Lochak G. C. R. Acad. Sc. (Paris), **260**, 72—75, 1965.
14. Lochak G. J. Phys. Rad., **26**, 235—241, 1965.
15. Francon M. Diffraction. Coherence en optique. P., 1964, pp. 54, 55, 61; Франсон М., Сланский С. Когерентность в оптике. М., «Наука», 1967, стр. 25.

Поступила в редакцию
7.4 1968 г.

Кафедра
общей физики для физического
фак-та МГУ
Ин-т им. Анри Пуанкаре факультет
наук Парижского университета