Задание от 27 июля

Автор: Хоружий Кирилл
Соавтор: Примак Евгений

От: *27 июля 2021 г.*

1.1 Спин электрона в переменном B

Поместили атомы в переменное магнитное поле вида

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0 \boldsymbol{z}_0 + B_\perp \boldsymbol{x}_0 \cos(\omega t) + B_\perp \boldsymbol{y}_0 \sin \omega t,$$

Тогда гамильтониан получился бы

$$\hat{V} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B} = \Big/ \hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e}{m_e c} \hat{\boldsymbol{S}} \Big/ = -\left(\frac{e\hbar B_\perp}{2m_e c}\right) \Big[\cos(\omega t)(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) - i \sin(\omega t)(|+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +|\Big],$$

откуда и находим, что

$$\gamma = -\frac{e\hbar B_\perp}{2m_e c}.$$

1.2 Электронный парамагнитный резонанс

Теперь уже внешнее поле имеет вид

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0 \boldsymbol{z}_0 \cos(\nu t),$$

с намильтонианом, вида

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \qquad \hat{V}(t) = \hbar \omega_L \hat{S}_z \cos(\nu t).$$

Выразим $\hat{S}_z$ и $\hat{S}_x$ (для второй части задания) через базисные состояния F_z, F^2, S^2, I^2:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_z = {} & \tfrac{1}{2}|1,0\rangle\langle 0,0| + \\
& + \tfrac{1}{2}|0,0\rangle\langle 1,0| - \tfrac{1}{2}|1,0\rangle\langle 0,0||1,-1\rangle\langle 1,-1| + \tfrac{1}{2}|1,0\rangle\langle 0,0||1,1\rangle\langle 1,1|, \\
\hat{S}_x = {} & |1,-1\rangle\langle 0,0| + |1,1\rangle\langle 0,0| + \\
& + |1,-1\rangle\langle 1,0| - |1,1\rangle\langle 1,0| - |0,0\rangle\langle 1,-1| - |1,0\rangle\langle 1,-1| - |0,0\rangle\langle 1,1| + |1,0\rangle\langle 1,1|,
\end{aligned}$$

где только первые строчки будут влиять на $\langle F = 1, F_z = \{1,0,-1\}|\hat{S}_{z,x}|F = 0\rangle$. Отсюда сразу находим, что только при $|n\rangle = |F = 1, F_z = 0\rangle$ будет

$$\langle 1,0|\hat{S}_z|0,0\rangle \neq 0, \qquad \langle 1,\pm 1|\hat{S}_z|0,0\rangle = 0.$$

Также сразу видно, что если направить поле по $\boldsymbol{x}_0$: $\boldsymbol{B}(t) = B_0 \boldsymbol{x}_0 \cos(\nu t)$, то

$$\langle 1,0|\hat{S}_z|0,0\rangle = 0, \qquad \langle 1,\pm 1|\hat{S}_z|0,0\rangle \neq 0.$$

Также получили, что

$$\gamma = \frac{\omega_L}{2},$$

то есть нашли частоту Раби для резонанса.

1.3 Электродипольный переход 1s → 2p

Поместим атом водорода в поле $\boldsymbol{E}$ вида

$$\boldsymbol{E}(z,\, t) = E_0 \boldsymbol{\sigma}_+ e^{-i\omega t + ikz} + \text{c.c.}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_+ = -\frac{\boldsymbol{x}_0 + i\boldsymbol{y}_0}{\sqrt{2}}, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{E}(z,t) = -\frac{E_0}{\sqrt{2}}\left(\boldsymbol{x}_0 \cos(\omega t) + \boldsymbol{y}_0 \sin(\omega t - kz)\right).$$

Гамильтониан, описывающий динамику тогда

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{\hat{r}} - \hat{\boldsymbol{d}} \cdot \boldsymbol{E}(\hat{z},\, t) = H_0 + V(t),$$

где возмущение, зависящее от времени,

$$\hat{V}(t) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{x}_0 \cos(\omega t - kz) + \hat{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{y}_0 \sin(\omega t - kz)\right).$$

Электродипольное приближение. Сразу перейдём к рассмотрению электродипольного приближения и перейдём к сферическим координатам:

$$\hat{V}(t) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{x}_0\cos(\omega t) + \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}_0\sin(\omega t)\right) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(r\sin\theta\cos\varphi\cos\omega t + r\sin\theta\sin\varphi\sin\omega t\right).$$

Систему полагаем при $t=0$ в состоянии $|i\rangle = |n=1, l=0, m=0\rangle$. Из нестационарной теории возмущений можем найти оценку (в первом приближении) для вероятности перехода в состояние $|n\rangle$:

$$c_n(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\langle n|V|i\rangle\, dt.$$

Для состояний водорода знаем волновые функции, разложим их на сферический гармоники, и найдём матричные элементы $\hat{V}$:

$$\psi_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}},\qquad \begin{aligned} \psi_{1,1} &= -\tfrac{1}{2}e^{i\varphi}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\theta,\\ \psi_{1,1} &= \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{\pi}}\cos\theta,\\ \psi_{1,-1} &= \tfrac{1}{2}e^{-i\varphi}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\theta, \end{aligned}\qquad\Rightarrow\qquad \begin{aligned} \psi_{1,1}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= -\tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{2}}e^{i\varphi}\cos(\varphi-\omega t)\sin^2(\theta).\\ \psi_{1,0}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= \tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{4}}\cos(\varphi-\omega t)\sin(2\theta),\\ \psi_{1,-1}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= \tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{2}}e^{-i\varphi}\cos(\varphi-\omega t)\sin^2(\theta). \end{aligned}$$

Осталось проинтегрировать, и получить

$$\begin{aligned} \langle\psi_{1,1}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= -\tfrac{1}{8}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\pi e^{i\omega t},\\ \langle\psi_{1,0}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= 0\\ \langle\psi_{1,-1}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= \tfrac{1}{8}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\pi e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Подставим это в выражение для $c_n(t)$, и получим

$$\begin{aligned} c_{|2,1,1\rangle}(t) &= -\frac{\pi}{8}\sqrt{\frac{3}{4}}\frac{eEf_r}{\Delta E+\omega\hbar}\left(1-\exp\left(\frac{it(\Delta E+\omega\hbar)}{\hbar}\right)\right),\\ c_{|2,1,-1\rangle}(t) &= \frac{\pi}{8}\sqrt{\frac{3}{4}}\frac{eEf_r}{\Delta E-\omega\hbar}\left(1-\exp\left(\frac{it(\Delta E-\omega\hbar)}{\hbar}\right)\right) \end{aligned}$$

где f_r возникает из интегрирования по r, – некоторая размерная констанста для этого перехода. Вероятности же перехода получаются равными

$$\begin{aligned} |c_{|2,1,1\rangle}(t)|^2 &= \frac{3\pi^2}{64}\left(\frac{Eef_r}{\Delta E+\omega\hbar}\right)^2\sin^2\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta E+\omega\hbar}{\hbar}t\right);\\ |c_{|2,1,-1\rangle}(t)|^2 &= \frac{3\pi^2}{64}\left(\frac{Eef_r}{\Delta E-\omega\hbar}\right)^2\sin^2\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta E-\omega\hbar}{\hbar}t\right). \end{aligned}$$

Получается, что в резонансе при $\omega = \Delta E/\hbar$ будет происходить переход в $|2,1,-1\rangle$, а при $\omega = -\Delta E/\hbar$ будет происходить переход в $|2,1,1\rangle$. Аналогично можно показать, что при $\boldsymbol{E}\parallel\boldsymbol{z}_0$ будет происходить переход в $|2,1,0\rangle$.

Условие резонанса. Для резонанса необходимо

$$\omega = \frac{E_2-E_1}{\hbar} \approx 1.5\times10^{16}\ \text{Гц} \sim \lambda = 19\ \text{нм},$$

что соответствует сильно ультрафиолетовому свету.

Найдём частоту Раби, так как задача в резонансе сводится в системе с двумя состояниями, можем найти

$$\gamma = \frac{eE_0f_r}{\sqrt{2}} \approx eE_0a_0,$$

где a_0 – радиус Бора.

1.4 Теория возмущений

Дан гамильтониан двухуровневой системы

$$\hat{H} = \hbar\omega_{\text{L}}\left|+\right\rangle\left\langle+\right| + \overbrace{\frac{\hbar\gamma}{2}e^{i\omega_{\text{L}}}\left|+\right\rangle\left\langle-\right| + \frac{\hbar\gamma}{2}e^{-i\omega_{\text{L}}}\left|-\right\rangle\left\langle+\right|}^{\hat{V}}.$$

В начальный же момент времени система находится в состоянии $|-\rangle$, то есть $c_-(t=0)=1$. Посмотрим же как в зависимости от времени меняется вероятность системы находится в состоянии $|+\rangle$. Будем следить за $c_+(t)$ и надеяться, что $|c_+(t)| \ll 1$.

Константа при переходе из состояния $|-\rangle$ в $|+\rangle$ выражается интегралом:

$$c_+(t) \approx \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\frac{E_+ - E_-}{\hbar}\tau} \langle + | \hat{V} | - \rangle \, d\tau.$$

Свертка с базисными бра-кетами оставит нам только первое слагаемое в $\hat{V}$, а получившееся выражение уже не сложно проинтегрировать:

$$c_+(t) \approx \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \frac{\hbar\gamma}{2} e^{i\left(\frac{E_+ - E_-}{\hbar} - \omega_{\mathrm{L}}\right)\tau} d\tau = \frac{\hbar\gamma}{2} \frac{1}{\hbar\omega_{\mathrm{L}} - \Delta E} \left(e^{i\frac{\Delta E - \hbar\omega_{\mathrm{L}}}{\hbar}t} - 1\right).$$

Её модуль:

$$c_+^2(t) = \frac{\hbar^2\gamma^2}{(\hbar\omega_{\mathrm{L}} - \Delta E)^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta E - \hbar\omega_{\mathrm{L}}}{\hbar} t\right) \qquad \Rightarrow \qquad |c_+(t)| = \frac{\hbar\gamma}{\Delta E - \hbar\omega_{\mathrm{L}}} \sin\left(\frac{\Delta E - \hbar\omega_{\mathrm{L}}}{2\hbar} t\right)$$

И оно действительно много меньше единицы, если коэффициент перед синусом мал.

Однако, в нашей задаче собственные числа $\hat{H}_0$ как раз и дают $\Delta E = \hbar\omega_{\mathrm{L}}$. При взятии интеграла мы и упустили эту точку, а именно, резонанс, то есть когда $\hbar\omega_{\mathrm{L}} = E_+ - E_- (= \Delta E)$, тогда интеграл просто расходится при $t \to \infty$:

$$c_+^2(t)\Big|_{\hbar\omega_{\mathrm{L}} \to \Delta E} = \frac{\gamma^2 t^2}{4} \qquad \Rightarrow \qquad |c_+(t)| = \frac{\gamma t}{2} \xrightarrow{t\to\infty} \infty.$$

Однако при небольших временах, то есть $t \ll \gamma \left(= \frac{e\hbar B_\perp}{2m_e c}\right)$, у нас всё ещё работает наша теория.