Задание от 20 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 J_z, J^2, S^2, I^2:

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\left(|0\rangle\langle 0|10 - |1,-1\rangle\langle 1,-1| + |10\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11| \right),$$

1.3 Электродипольный переход $1\mathrm{s} \to 2\mathrm{p}$

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

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

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

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

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

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

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

$$\omega = \frac{E_2-E_1}{\hbar} \approx 1.5\times 10^{16}\ \text{Гц} \sim \lambda = 19\ \text{нм},$$

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.