# Атомная физика

Лекция 16

проф. Попов Александр Михайлович

# Квантовая система в поле электромагнитной волны. Многофотонные процессы

Считаем, что знаем «атомный» гамильтониан и умеем решать задачу на его собственные значения и функции

$$\widehat{H_0}\psi_n = E_n\psi_n$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t), \quad W(\vec{r},t) = -\hat{\vec{d}}\vec{E}(t) \qquad \psi(\vec{r}, t=0) = \psi_i(\vec{r})$$

Решение

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \qquad C_n(t=0) = \delta_{ni} = \begin{cases} 0, & n \neq i, \\ 1, & n = i, \end{cases}$$

$$i\hbar\frac{dC_f}{dt} = \sum_n C_n\left\langle\psi_f\middle|\hat{W}\middle|\psi_n\right\rangle\exp(i\omega_{fn}t)$$

Под действием поля в системе возникают переходы

Обозначения $\left\langle\psi_f\middle|\hat{W}\middle|\psi_n\right\rangle = \left\langle f\middle|\hat{W}\middle|n\right\rangle = W_{fn} = \int\psi_f^*\hat{W}\psi_n d\tau$ $\qquad \omega_{fn} = (E_f - E_n)/\hbar$ - частота перехода

# Нестационарная теория возмущений

$$i\hbar\frac{dC_f}{dt}=\sum_n C_n\left\langle\psi_f\left|\hat{W}\right|\psi_n\right\rangle\exp(i\omega_{fn}t)$$

Разложение по малому параметру *E/Eat*

$$C_n=C_n^{(0)}+C_n^{(1)}+C_n^{(2)}+\ldots$$

Первый порядок

$$i\hbar\frac{dC_f^{(1)}}{dt}=\left\langle\psi_f\left|\hat{W}\right|\psi_i\right\rangle\exp(i\omega_{fi}t)$$

Второй порядок

$$i\hbar\frac{dC_f^{(2)}}{dt}=\sum_n C_n^{(1)}\left\langle\psi_f\left|\hat{W}\right|\psi_n\right\rangle\exp(i\omega_{fn}t)$$

k-тый порядок теории возмущений

$$i\hbar\frac{dC_f^{(k)}}{dt}=\sum_n C_n^{(k-1)}\left\langle\psi_f\left|\hat{W}\right|\psi_n\right\rangle\exp(i\omega_{fn}t)$$

# Двухфотонные (двухквантовые) переходы

**Свойства двухквантовых переходов**

1) Зависимость от интенсивности $w_{fi}^{(2)} \sim E_0^4 \sim I^2$

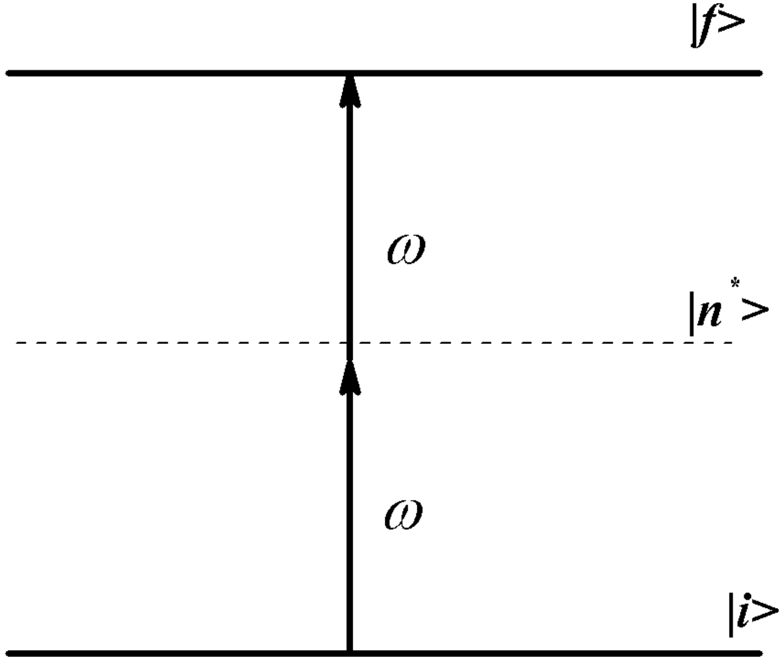
2) Правила отбора $|i\rangle \to |n\rangle \to |f\rangle$ $\quad \ell_f = \ell_n \pm 1 = \begin{cases} \ell_i, \\ \ell_i \pm 2. \end{cases}$ $\quad \Delta\ell = 0, \pm 2$

3) Сравнение с вероятностью однофотонных переходов $\dfrac{w_{fi}^{(2)}}{w_{fi}} \sim \left(\dfrac{d_{fi}E}{\hbar\omega_{fi}}\right)^2 \sim \left(\dfrac{ea_0E}{e^2/a_0}\right)^2 \sim (E/E_{at})^2$

4) Роль резонансов

$$w_{fi}^{(2)} = \left| \frac{d_{fn^*} d_{n^*i} E_0^2}{4\hbar^2} \times \frac{1}{(\omega_{n^*i} - \omega)} \right|^2 \times 2\pi\delta(\omega_{fi} - 2\omega)$$

Проблема полюсов в знаменателе



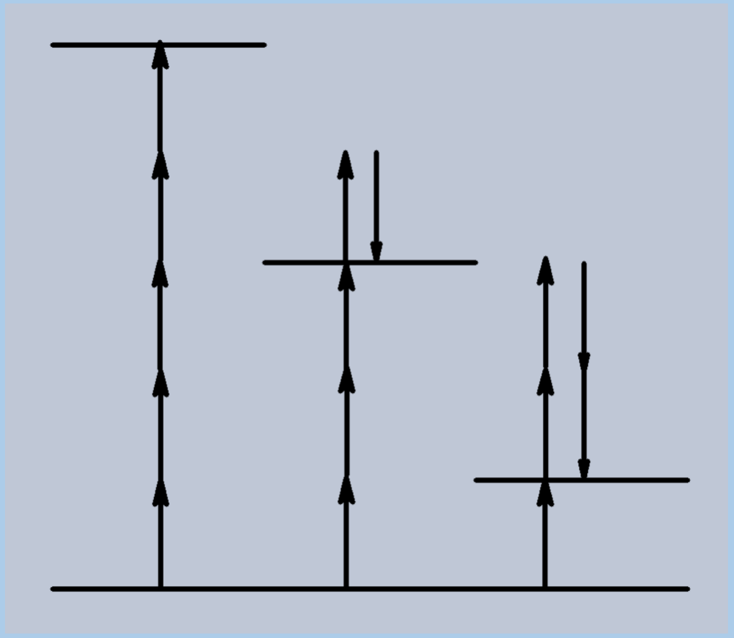
# Высшие порядки теории возмущений

Многофотонные процессы

$$w^{(k)} \sim I^k$$

$$E_f = E_i \pm k\hbar\omega$$

5ый порядок ТВ



В общем случае в *k*-том порядке ТВ возможно поглощение *m* и испускание *m-k* фотонов

Правила отбора для k фотонных переходов??

# Второй порядок ТВ:  двуцветные поля

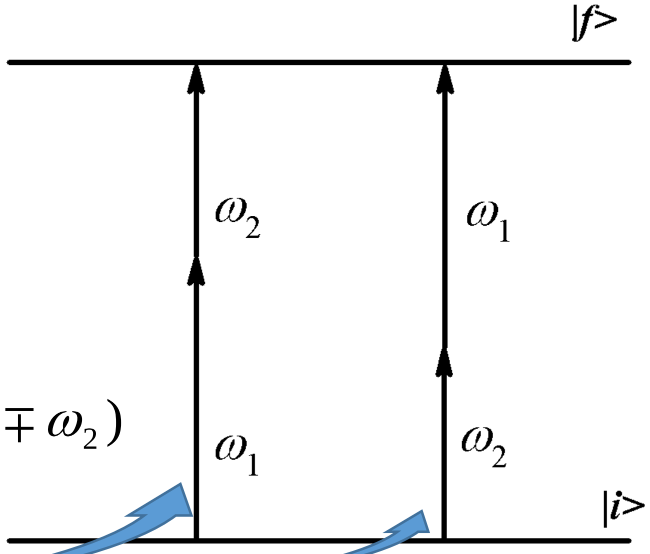
$$\vec{E} = \vec{E}_1 \cos\omega_1 t + \vec{E}_2 \cos\omega_2 t$$

Во втором порядке дополнительно появятся процессы поглощения квантов из разных волн

$$E_f = E_i + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2,$$
$$E_f = E_i - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2.$$

вероятности «-» поглощение, «+» - испускание

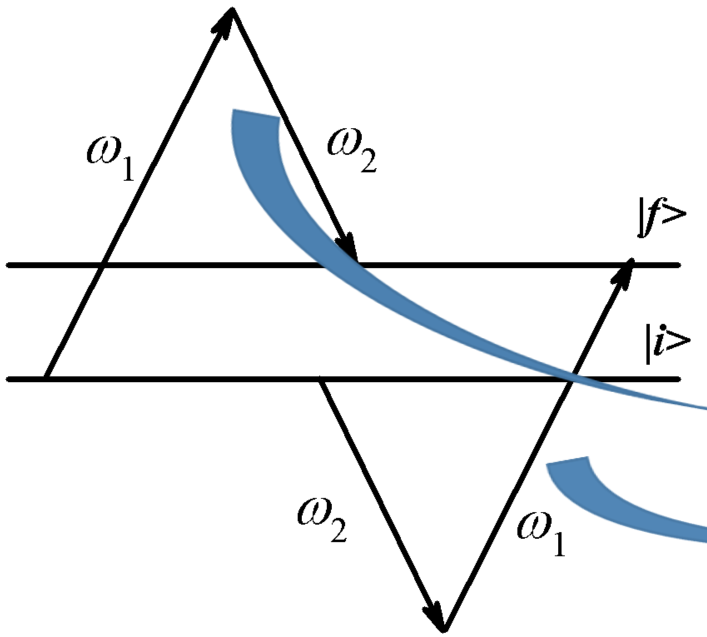
$$w_{fi}^{(2)} = \left| \sum_n \frac{(\vec{d}_{fn}\vec{E}_2)(\vec{d}_{ni}\vec{E}_1)}{4\hbar^2} \times \frac{1}{(\omega_{ni} \mp \omega_1)} + \frac{(\vec{d}_{fn}\vec{E}_1)(\vec{d}_{ni}\vec{E}_2)}{4\hbar^2} \times \frac{1}{(\omega_{ni} \mp \omega_2)} \right|^2 \times 2\pi\delta(\omega_{fi} \mp \omega_1 \mp \omega_2)$$



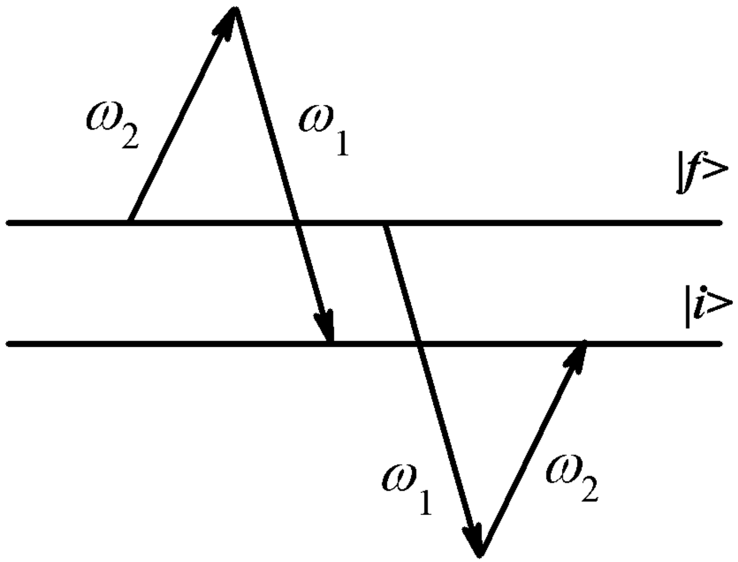

Еще возможно поглощение кванта из одного пучка и испускание в другой.

# Переходы $\Lambda$ – типа

$$\text{Пусть } \omega_1 > \omega_2$$

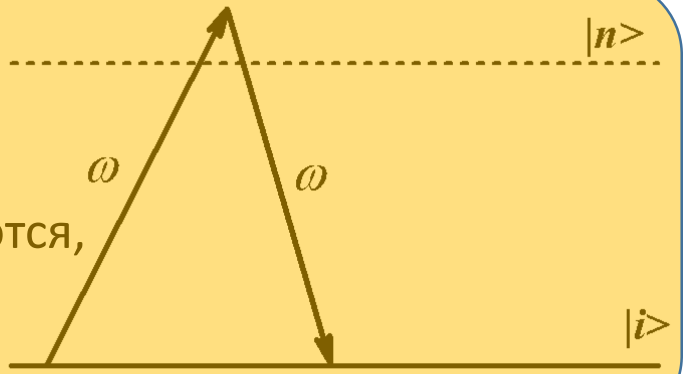



$$w_{fi}^{(2)} = \left| \sum_n \frac{(\vec{d}_{fn}\vec{E}_2)(\vec{d}_{ni}\vec{E}_1)}{4\hbar^2} \times \frac{1}{(\omega_{ni} - \omega_1)} + \frac{(\vec{d}_{fn}\vec{E}_1)(\vec{d}_{ni}\vec{E}_2)}{4\hbar^2} \times \frac{1}{(\omega_{ni} + \omega_2)} \right|^2 \times 2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega_1 + \omega_2)$$

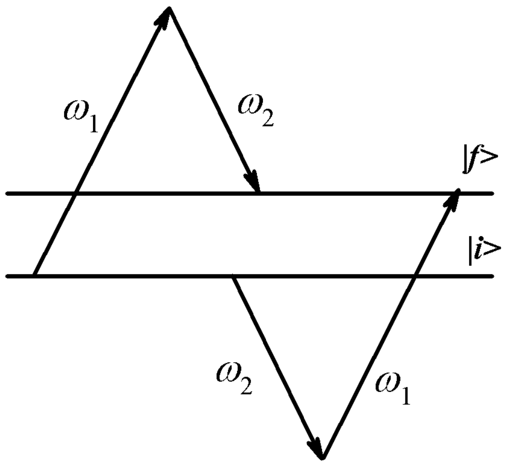



$$\omega_1 = \omega_2, \quad |f\rangle = |i\rangle$$

Но это разные пучки, отличаются, например направлением k



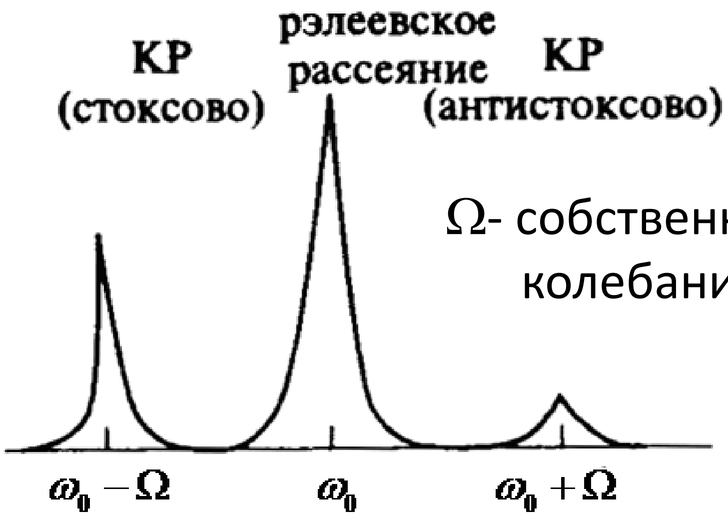
# Связь с релеевским и комбинационным рассеянием



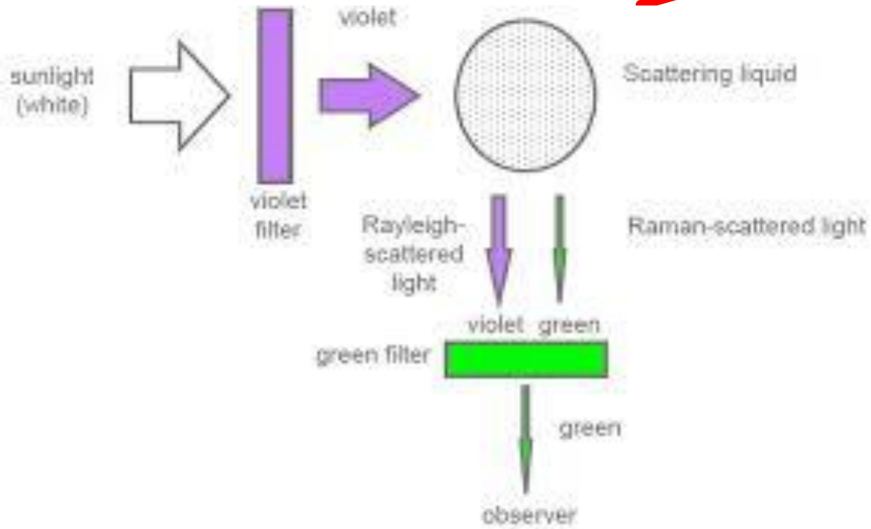

Комбинационное рассеяние (1928)

(Ландсберг, Мандельштам, Раман, Кришнан)

Релеевское рассеяние (1871 – зависимость интенсивности от длины волны)
молекулярное рассеяние, или рассеяние на частицах, размеры которых много меньше $\lambda$.




$\Omega$- собственная частота колебаний среды

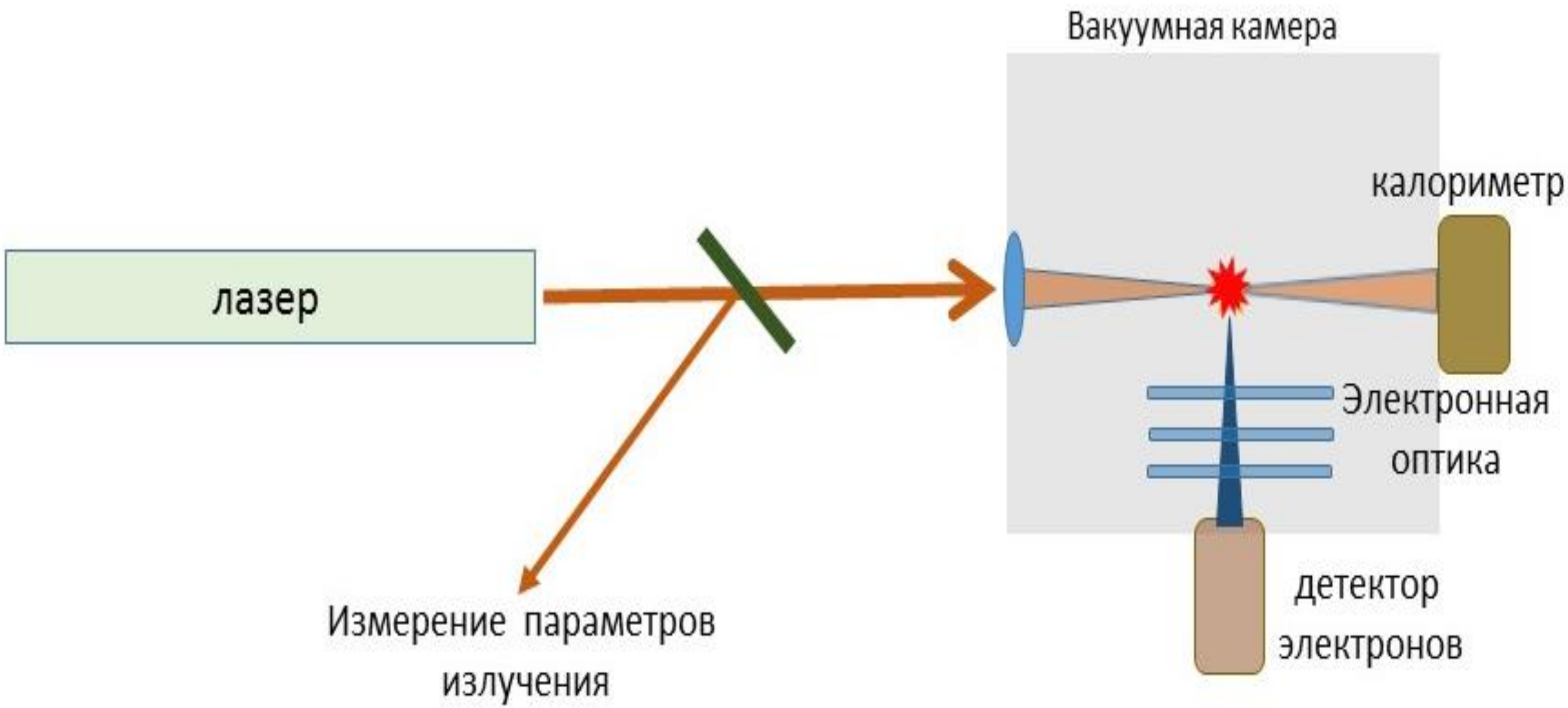



Спектроскопия
1) анализ строения молекул, кристаллов, …
2) изучение динамики процессов в различных средах (населенности различных состояний, температура и т.п.

# Опыты Делоне (1964)
# Многоквантовый фотоэффект

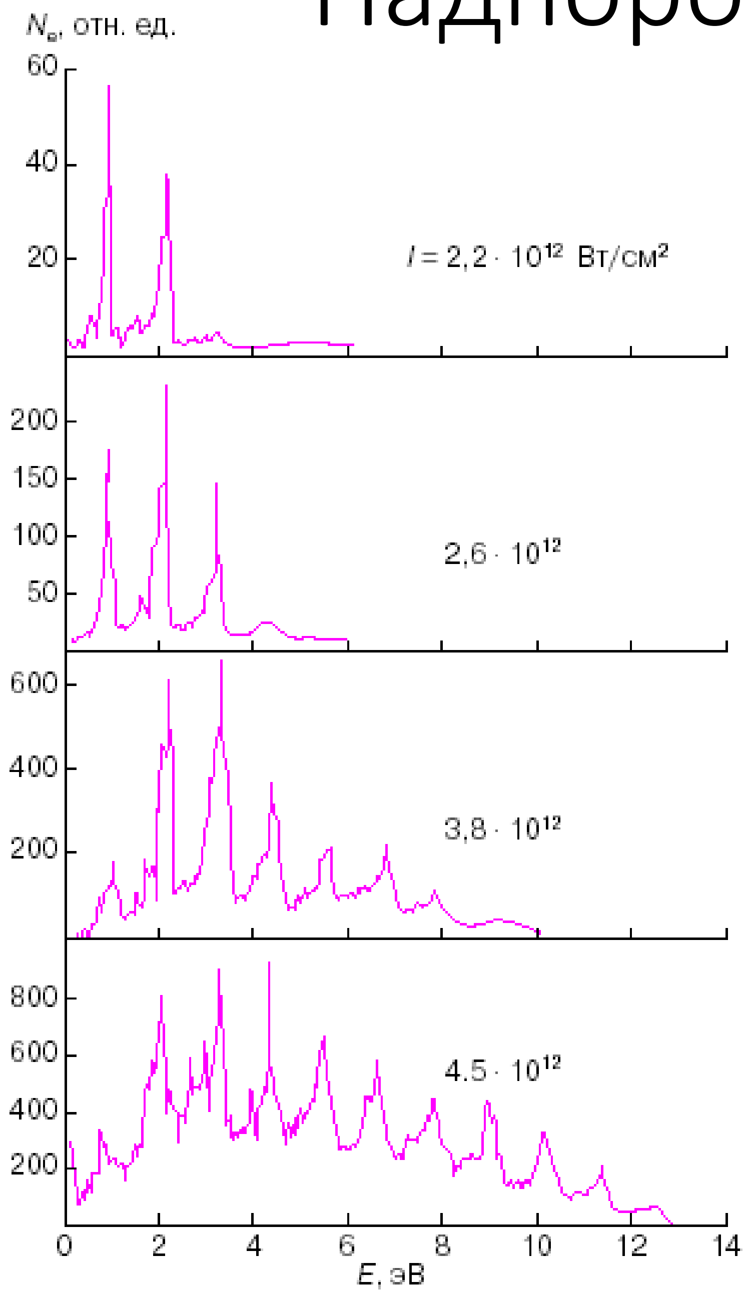
Семифотонная ионизация атомов ксенона (12.13 эВ) импульсом рубинового лазера (1.78 эВ)

$$E_k = N\hbar\omega - I_i$$




вероятность $\sim I^N$

# Надпороговая ионизация атомов (ATI)
# P. Agostini,1979




ATI **(above threshold ionization)** - поглощение избыточного числа квантов сверх минимально необходимого для перехода в континуум

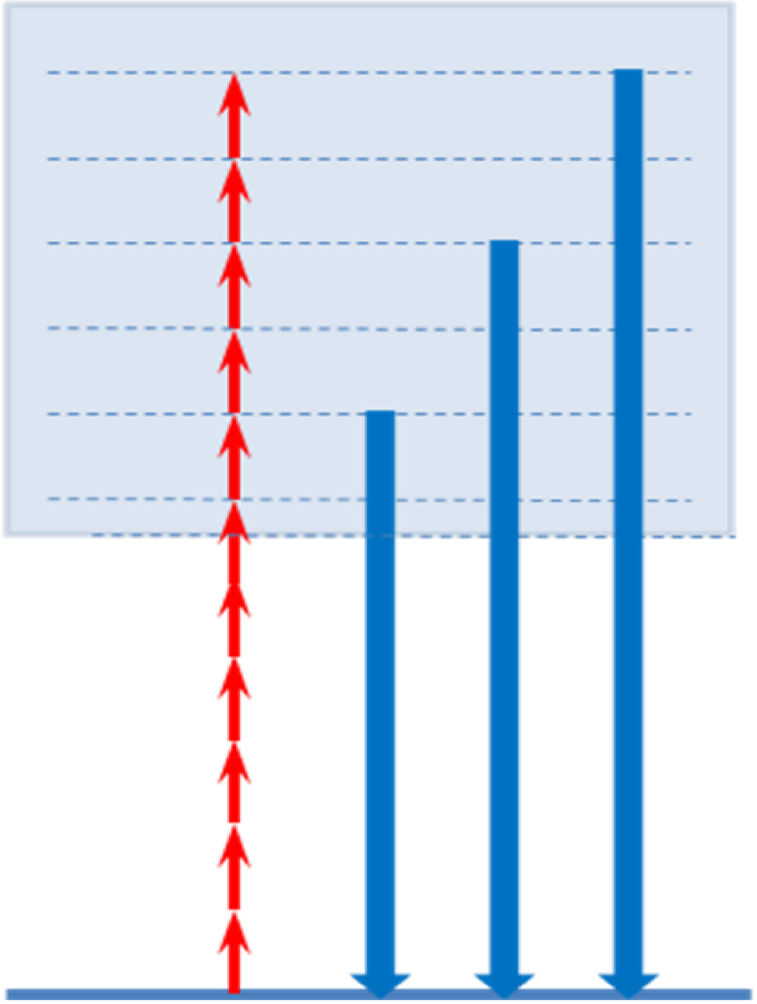
1) В режиме ТВ $\dfrac{w^{(N+n)}}{w^{(N)}} \sim (I / I_{at})^n$

2) С ростом интенсивности излучения интенсивность надпороговых пиков растет

3) Положения ATI пиков с увеличением интенсивности смещается в область меньших энергий, вследствие сдвига границы континуума, можно наблюдать закрытие каналов ионизации

спектры фотоэлектронов при ионизации атомов ксенона излучением *Nd* лазера ($\lambda$=*1064* нм, 1.17 эВ) с интенсивностью $10^{12}$ - $10^{13}$ Вт/см$^2$

# ATI и генерация высоких гармоник



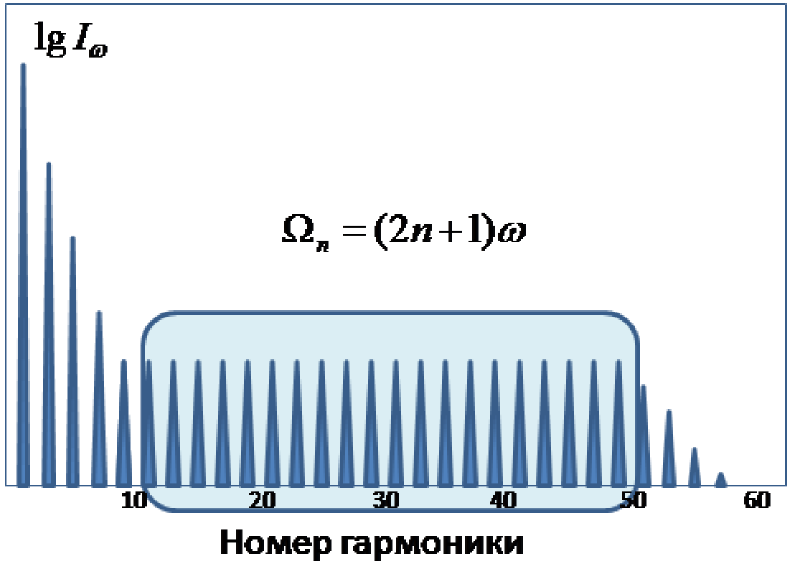
В континууме заселяется набор состояний

$$E_n \approx (N+n)\hbar\omega - I_i$$

Рекомбинация из этих состояний континуума приводит к генерации высокочастотных гармоник **(нечетных) ???**

$$\hbar\Omega_k = \hbar\omega(2n+1) \qquad Здесь \quad n \geq n_{\min}, \quad n_{\min} = N$$

**Непертурбативный режим ионизации: спектр гармоник**




один из подходов к генерации коротковолнового излучения и импульсов аттосекундной длительности

# Отклик атомной системы на внешнее поле

## Классическая модель среды

Атом – гармонический осциллятор

$$\ddot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = 0$$

$\Omega_0$ - инфракрасный, оптический или ультрафиолетовый диапазон частот.

Теоретическая основа – модель атома Томсона

В задачах взаимодействия с веществом справедливо и в квантовой механике!!!

**Дипольное приближение**

$v << c$ – *мала магнитная компонента силы Лоренца*

$a << \lambda$ – *электрическое поле волны пространственно однородно*

**АТОМ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ**

$$\vec{F} = e\vec{E}(\cancel{\vec{r}},t) + \cancel{\frac{e}{c}\left[\dot{\vec{r}},\vec{H}(\vec{r},t)\right]}$$

$$\ddot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = \frac{e\vec{E}(t)}{m}$$

# Отклик атома на внешнее поле: классическая модель

$$\ddot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = e\vec{E}(t)/m = e\vec{E}_0 \exp(-i\omega t)/m$$

Будем искать решение уравнения в виде:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_\omega \exp(-i\omega t)$$

$$-\omega^2 \vec{r}_\omega + \Omega_0^2 \vec{r}_\omega = e\vec{E}_\omega / m$$

дипольный момент $\vec{d}_\omega = e\vec{r}_\omega = e^2 \vec{E}_\omega / m(\Omega_0^2 - \omega^2) = \chi_\omega \vec{E}_\omega$

$\chi_\omega = e^2 / m(\Omega_0^2 - \omega^2)$ - линейная атомная восприимчивость (поляризуемость)

1) в низкочастотной области ( $\omega << \Omega_0$ ) величина восприимчивости не зависит от частоты,

$$\chi_\omega^{low} \approx e^2 / m\Omega_0^2$$

2) на высоких частотах ( $\omega >> \Omega_0$ ): $\chi_\omega^{high} \approx -e^2 / m\omega^2$

(неограниченно убывает по абсолютному значению с повышением частоты)

Зависимость $\chi_\omega$ от частоты поля волны – дисперсия!!

**из выражения для функции отклика следует линейная связь наведенного дипольного момента и поля:**

$$\vec{d}_\omega = \chi_\omega \vec{E}_\omega$$

Макроскопический дипольный момент среды (вектор поляризации):

$$\vec{P}_\omega = N\vec{d}_\omega = N\chi_\omega \vec{E}_\omega \quad \Rightarrow \quad \vec{D}_\omega = (1 + 4\pi N\chi_\omega)\vec{E}_\omega = \varepsilon_\omega \vec{E}_\omega$$

$$\boxed{\varepsilon_\omega = 1 + 4\pi N\chi_\omega = 1 + \frac{4\pi Ne^2}{m(\Omega_0^2 - \omega^2)}}$$

В частности, плазма – свободный электронный газ $\Omega_0 = 0$

$$\boxed{\varepsilon_\omega = 1 + 4\pi N\chi_\omega = 1 - \frac{4\pi Ne^2}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$

$\omega_p = \sqrt{\dfrac{4\pi Ne^2}{m}}$ - плазменная частота

# Отклик атома на внешнее поле: квантовомеханическая модель

Рассмотрим среду, как совокупность отдельных атомов, находящихся первоначально в основном состоянии и не взаимодействующих между собой

средний по квантовому состоянию дипольный момент атома:

$$\left\langle \vec{d}(t) \right\rangle = e\int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)d^3r$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t)$$

$\hat{W}(\vec{r},t)$ - взаимодействие с квантовой системой в дипольном приближении

атом в начальный момент времени находится в стационарном (основном) состоянии $\left|i\right\rangle$

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$$

Надо решать систему уравнений для коэффициентов разложения $C_n(t)$: переходы $\left|i\right\rangle \to \left|n\right\rangle$

# Отклик атома на внешнее поле: квантовомеханическая модель

Поляризационный отклик атома $\vec{P} = N\left\langle \vec{d} \right\rangle$ $\left\langle \vec{d}(t) \right\rangle = e\int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)d^3r$

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$$

Мгновенное включение поля

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{d_{ni}E_0}{2\hbar}\left(\frac{\exp(i(\omega_{ni}-\omega)t)-1}{\omega_{ni}-\omega} + \frac{\exp(i(\omega_{ni}+\omega)t)-1}{\omega_{ni}+\omega}\right)$$

Адиабатическое (плавное) включение поля

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{d_{ni}E_0}{2\hbar}\left(\frac{\exp(i(\omega_{ni}-\omega)t)}{\omega_{ni}-\omega} + \frac{\exp(i(\omega_{ni}+\omega)t)}{\omega_{ni}+\omega}\right)$$

При адиабатическом включении поля забывается начальное условие

# Отклик атома на внешнее поле: квантовомеханическая модель

$$\psi(\vec r,t)=\psi_i(\vec r)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_i t\right)+\sum_{n\neq i}C_n^{(1)}(t)\psi_n(\vec r)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \qquad \left\langle \vec d(t)\right\rangle = e\int\psi^*(\vec r,t)\vec r\,\psi(\vec r,t)d^3r$$

$$\vec d(t)=e\sum_{n\neq i}\int\psi_i^*(\vec r)\vec r\,\psi_n(\vec r)d^3r\cdot\exp(-i\omega_{ni}t)\times\frac{\vec d_{ni}\vec E_0}{2\hbar}\left(\frac{\exp(i(\omega_{ni}-\omega)t)}{(\omega_{ni}-\omega)}+\frac{\exp(i(\omega_{ni}+\omega)t)}{(\omega_{ni}+\omega)}\right)+c.c.$$

$$=\sum_{n\neq i}\frac{\left|d_{ni}\right|^2\vec E_0}{2\hbar}\left(\frac{\exp(-i\omega t)}{(\omega_{ni}-\omega)}+\frac{\exp(i\omega t)}{(\omega_{ni}+\omega)}\right)+c.c.=\sum_{n\neq i}\frac{\left|d_{ni}\right|^2}{\hbar}\frac{2\omega_{ni}}{\omega_{ni}^2-\omega^2}\times\vec E_0\cos\omega t$$

$$\vec d_{nn}=\left\langle\psi_n\middle|\vec d\middle|\psi_n\right\rangle\equiv 0$$

дипольный момент пропорционален  полю э/м волны, коэффициент пропорциональности:

$$\chi_\omega=\sum_{n\neq i}\frac{\left|d_{ni}\right|^2}{\hbar}\frac{2\omega_{ni}}{\omega_{ni}^2-\omega^2}$$

- поляризуемость атома в квантовомеханической теории

# Квантовый vs классический подход в вычислению линейной поляризуемости среды

$$\chi_\omega = \sum_{n\neq i} \frac{|d_{ni}|^2}{\hbar} \frac{2\omega_{ni}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2}$$ - поляризуемость атома в квантовомеханической теории

$$\chi_\omega = e^2 / m(\omega_0^2 - \omega^2)$$ - поляризуемость атома в классической теории

$$f_{ni} = \frac{\chi_\omega}{\chi_\omega^{(classic)}} = \frac{|z_{ni}|^2}{\hbar/(2m\omega_{ni})}$$

правило сумм: $\sum_n f_{ni} \equiv 1$ - сила осциллятора атомного перехода

**диэлектрическая проницаемость разреженного газа:**

$$\varepsilon_\omega = 1 + 4\pi N \chi_\omega = 1 + \frac{4\pi e^2 N}{m} \sum_n \frac{f_{ni}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2}$$

**Вывод: атом с точки зрения отклика на внешнее поле ведет себя как совокупность осцилляторов**

С точки зрения классики: казалось бы сила осциллятора – это число атомных электронов, качающихся на заданной частоте. Должно быть $f = 1, 2, 3, \ldots$ ?????

# Разложение поляризационного отклика по степеням поля

средний по квантовому состоянию дипольный момент:

$$\langle \vec{d}(t) \rangle = e \int \psi^*(\vec{r},t)\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)d^3r$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t)$$

$$\hat{W}(\vec{r},t) = -\vec{d}\vec{E}(t)$$

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \cos \omega t$$

атом в начальный момент времени находится в стационарном (основном) состоянии $|i\rangle$

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$$

$$i\hbar \frac{dC_f}{dt} = \sum_n C_n \langle \psi_f | \hat{W} | \psi_n \rangle \exp(i\omega_{fn} t)$$

$$C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + \ldots$$

$$i\hbar \frac{dC_f^{(k)}}{dt} = \sum_n C_n^{(k-1)}(t) \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_n \rangle \exp(i\omega_{fn} t)$$

По выражению k-1 порядка легко найти решение в k-том порядке

# Нелинейная оптика

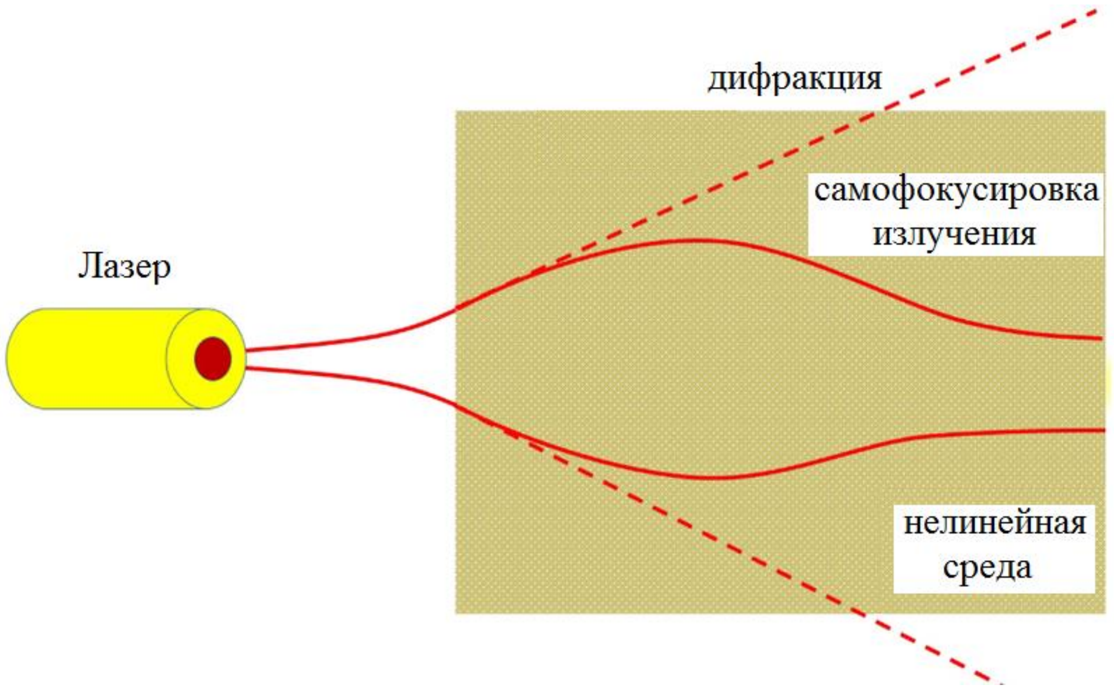
## Эффекты второго порядка (квадратичная восприимчивость в нелинейных кристаллах)

1) Генерация второй гармоники
2) Оптическое детектирование (выпрямление)
3) Комбинационное рассеяние
4) Параметрическое рассеяние света

## Эффекты третьего порядка (кубическая восприимчивость)

1) Генерация третьей гармоники
2) Самофокусировка излучения

# Самофокусировка и самодефокусировка излучения в нелинейной среде




$\chi^{(3)} > 0$ - электрическое поле волны в среде создает само себе **собирающую линзу**. Именно в такой среде возможно возникновение **эффекта самофокусировки излучения**

$\chi^{(3)} < 0$ - электрическое поле волны формирует **рассеивающую линзу** для излучения. Возникает явление **самодефокусировки излучения**, когда расходимость пучка оказывается **больше дифракционной**

Предсказание эффекта: Г.Аскарьян (1962)

Первый эксперимент (Пилипецкий, Рустемов, 1965): Распространение сфокусированного пучка рубинового лазера мощностью ~20 МВт в органических жидкостях