

*Нашим учителям*

## Благодарности

Эта книга не могла бы состояться без наших старших наставников, коллег и студентов, чьи идеи породили множество задач и их решений, содержащихся в этой книге. Их предложения, постоянное соучастие и готовность рассматривать несчетное множество подходов были бесценны.

В частности, мы бы хотели отметить вдохновляющее влияние и вклад Евгения Б. Александрова, Льва М. Баркова, Ильи Безеля, Sarah Bickman, Chris J. Bowers, Sid B. Cahn, Eugene D. Commins, Damon English, Victor Flambaum, Wojciech Gawlik, Theodor W. Haensch, Robert A. Harris, Larry Hunter, J. D. Jackson, И. Б. Хрипловича, Gleb L. Kotkin, М. Г. Козлова, Vitaliy V. Kresin, Chih-Hao Li, Steve K. Lamoreaux, Jon M. Leinaas, Robert Littlejohn, Richard Marrus, Hitoshi Murayama, Frank A. Narducci, Anh-Tuan D. Nguyen, Simon M. Rochester, Michael V. Romalis, Jason E. Stalnaker, Herbert Steiner, Mark Strovink, Alexander O. Sushkov, Oleg P. Sushkov, Mahiko Suzuki, Jeff T. Urban, Arkady I. Vainshtein, David S. Weiss, Eric Williams, Valeriy V. Yashchuk, Jun Ye, Vladimir G. Zelevinsky и Max Zolotorev.

Мы хотим особенно поблагодарить Damon English за оформление обложки.

Авторы также благодарны за поддержку наших исследований, которые инициировали постановку многих задач этой книги, оказанную нам Национальным научным фондом, Департаментом военно-морских исследований и Миллеровским институтом фундаментальных исследований.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие к русскому изданию . . . . .	11
Предисловие переводчика и редактора перевода . . . . .	12
Введение . . . . .	13
Обозначения . . . . .	15
 Глава 1. Структура атома . . . . .	17
1.1. Основное состояние атома фосфора. . . . .	17
1.2. Обменное взаимодействие . . . . .	23
1.3. Спин-орбитальное взаимодействие . . . . .	25
1.4. Сверхтонкая структура и эффект Зеемана в атоме водорода . . . . .	28
1.5. Водородоподобные ионы . . . . .	32
1.6. Геоний . . . . .	35
1.7. Модель Томаса–Ферми ( $Y$ ) . . . . .	43
1.8. Электроны в оболочке. . . . .	45
1.9. Изотопический сдвиг и диаграмма Кинга. . . . .	49
1.10. Грубая модель отрицательного иона . . . . .	52
1.11. Смешивание состояний с различными $J$ за счет сверхтонкого взаимодействия . . . . .	53
1.12. Электронная плотность на ядре ( $Y$ ) . . . . .	56
1.13. Несохранение четности в атомах . . . . .	60
1.14. Несохранение четности в антиатомах . . . . .	70
1.15. Анапольный момент . . . . .	73
 Глава 2. Атомы во внешних полях . . . . .	80
2.1. Электрическая поляризуемость основного состояния водорода . . . . .	80
2.2. Поляризуемости высоковозбужденных атомных состояний . . . . .	83
2.3. Применение штарковских сдвигов для измерений электрических полей. . . . .	84
2.4. Частоты ларморовой прецессии для щелочных атомов . . . . .	85
2.5. Магнитное поле внутри намагниченной сферы . . . . .	88
2.6. Классическая модель магнитного резонанса . . . . .	88
2.7. Сдвиги уровней энергии в осциллирующих полях ( $Y$ ) . . . . .	93
2.8. Спиновая релаксация, связанная с неоднородностью магнитного поля . . . . .	103
2.9. Эффект $\vec{E} \times \vec{v}$ в газовых кюветах . . . . .	108
2.10. Полевая ионизация водорода . . . . .	110
2.11. Индуцированные электрическим полем сдвиги зеемановских подуровней . . . . .	111
2.12. Геометрическая фаза (фаза Берри) . . . . .	112

<b>Глава 3. Взаимодействие атомов со светом</b> . . . . .	117
3.1. Двухуровневая система в условиях периодического возмущения ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	117
3.2. Квантование электромагнитного поля ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	123
3.3. Испускание света атомами ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	128
3.4. Поглощение света атомами . . . . .	136
3.5. Сечение резонансного поглощения . . . . .	139
3.6. Сечение поглощения для линии с доплеровским уширением . . . . .	141
3.7. Параметры насыщения ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	142
3.8. Угловое распределение и поляризация атомной флуоресценции . . . . .	148
3.9. Изменения поглощения при оптической накачке . . . . .	152
3.10. Оптическая накачка и матрица плотности . . . . .	157
3.11. Каскадный распад . . . . .	161
3.12. Когерентное лазерное возбуждение . . . . .	163
3.13. Пролетное уширение . . . . .	164
3.14. Парадоксы флуоресценции и рассеяния света . . . . .	167
3.15. Вероятность двухфотонного перехода . . . . .	171
3.16. Зануление рамановского рассеяния . . . . .	173
3.17. Возбуждение атомов нерезонансными лазерными импульсами . . . . .	174
3.18. Магнитные дипольные ( $M1$ ) переходы, индуцированные сверхтонким взаимодействием . . . . .	178
<b>Глава 4. Взаимодействие света с атомами во внешних полях</b> . . . . .	180
4.1. Резонансное фарадеевское вращение . . . . .	180
4.2. Эффект Керра в атомной среде . . . . .	184
4.3. Эффект Ханле . . . . .	189
4.4. Индуцированный электрическим полем распад состояния $2^2S_{1/2}$ атома водорода . . . . .	191
4.5. Переходы, индуцированные эффектом Штарка ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	194
4.6. Магнитное отклонение света . . . . .	198
4.7. Классическая модель магнитометра с оптической накачкой . . . . .	202
4.8. Поиски постоянных электрических дипольных моментов ( $\mathcal{U}$ ) . . . . .	206
<b>Глава 5. Атомные столкновения</b> . . . . .	217
5.1. Столкновения в буферном газе . . . . .	217
5.2. Уширение спектральных линий, обусловленное диффузией фазы . . . . .	218
5.3. Сужение Дике . . . . .	220
5.4. Базовые понятия спин-обмена . . . . .	224
5.5. Приближение спиновой температуры . . . . .	228
5.6. Столкновения, приводящие к хаотизации . . . . .	230
5.7. Ларморова прецессия в условиях быстрого спинового обмена . . . . .	230
5.8. Ионизация Пеннинга для метастабильного атома гелия . . . . .	232

Глава 6. <b>Холодные атомы</b> . . . . .	235
6.1. Лазерное охлаждение: базовые идеи (У) . . . . .	235
6.2. Магнитооптические ловушки . . . . .	241
6.3. Зеемановский замедлитель . . . . .	245
6.4. Бозе-эйнштейновская конденсация (У) . . . . .	248
6.5. Бозе-эйнштейновская конденсация в оптической решетке . . . . .	258
6.6. Внутррезонаторное охлаждение . . . . .	260
6.7. Внутррезонаторное охлаждение многих частиц: стохастическое охлаждение . . . . .	265
6.8. Энергия Ферми для гармонической ловушки. . . . .	266
Глава 7. <b>Молекулы</b> . . . . .	269
7.1. Амплитуда молекулярных колебаний. . . . .	269
7.2. Колебательные постоянные для потенциала Морзе . . . . .	270
7.3. Центробежное растяжение . . . . .	272
7.4. Относительные плотности атомов и молекул в газовой фазе . . . . .	274
7.5. Изотопические сдвиги в молекулярных переходах . . . . .	279
7.6. Электрические дипольные моменты полярных молекул . . . . .	282
7.7. Скалярное взаимодействие ядерных спинов в молекулах. . . . .	286
Глава 8. <b>Экспериментальные методы</b> . . . . .	290
8.1. Отражение света от движущегося зеркала . . . . .	290
8.2. Лазерный нагрев малой частицы . . . . .	292
8.3. Спектр частотно-модулированного света . . . . .	294
8.4. Удвоение частоты модулированного света. . . . .	296
8.5. Звон расстроенного резонатора. . . . .	297
8.6. Пропускание света световодом . . . . .	298
8.7. Квантовые флуктуации световых полей . . . . .	300
8.8. Шум светоделиителя . . . . .	303
8.9. Дробовой шум фотонов в поляриметрии . . . . .	305
8.10. Управление поляризацией света с помощью фазовой пластинки. . . . .	306
8.11. Наложение импульсов при счете фотонов. . . . .	310
8.12. Фотоны в моде лазерного пучка . . . . .	311
8.13. Настройка лазера на красителе . . . . .	312
8.14. Волны материи и гироскоп Саньяка . . . . .	314
8.15. Фемтосекундные лазерные импульсы и частотные гребенки . . . . .	318
8.16. Флуктуации магнитного поля, связанные со случайными тепловыми токами . . . . .	322
Глава 9. <b>Разные другие темы</b> . . . . .	326
9.1. Прецессирует ли стрелка компаса? . . . . .	326
9.2. Поляризатор ультрахолодных нейтронов . . . . .	328
9.3. Экспоненциально растущее/затухающее гармоническое поле. . . . .	329

9.4. Магический угол . . . . .	331
9.5. Понимание правил отбора по коэффициентам Клебша–Гордона . . . . .	336
9.6. Маятник Капицы . . . . .	338
9.7. Визуализация атомной поляризации . . . . .	340
Приложение А. Единицы, коэффициенты преобразования и некоторые типичные величины . . . . .	348
Приложение В. Справочные данные по атомам водорода и щелочным атомам . . . . .	353
Приложение С. Спектроскопические обозначения для атомов и двухатомных молекул . . . . .	354
Приложение D. Описание поляризационных состояний света . . . . .	356
D.1. Параметры Стокса . . . . .	356
D.2. Метод расчета Джонса . . . . .	357
Приложение E. Углы Эйлера и матрицы поворота . . . . .	359
Приложение F. Теорема Вигнера–Эккарта и неприводимые тензоры . . . . .	361
F.1. Теорема Вигнера–Эккарта . . . . .	361
F.2. Неприводимые тензоры . . . . .	366
Приложение G. Матрица плотности . . . . .	368
G.1. Связь между матрицей плотности и волновой функцией . . . . .	368
G.2. Матрица плотности, усредненная по ансамблю . . . . .	370
G.3. Временная эволюция матрицы плотности: уравнение Лиувилля . . . . .	372
G.4. Моменты атомной поляризации . . . . .	374
Приложение H. Элементы фейнмановской диаграммной техники . . . . .	379
Список литературы . . . . .	382
Предметный указатель . . . . .	393

## **ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ**

После первой английской публикации этой книги в 2003 году издательством Oxford University Press мы были польщены широким распространением этого издания в сообществе физиков и студентов, специализирующихся в областях оптики, атомной и молекулярной физики, а также в целом положительной общественной оценкой нашей работы. Естественно, мы рады, что теперь наша книга становится доступной и для русскоязычного читателя.

Идея издания русской версии книги принадлежит профессору Александру Семеновичу Штейнбергу, которому мы выражаем свою искреннюю благодарность. Нам представляется большой удачей, что в издании в качестве тандема переводчик/редактор приняли участие специалисты такого ранга. Работа по переводу происходила в режиме on-line и часто сопровождалась профессиональными дебатами с двумя из авторов (D. B. и D. F. K.), результатом которых явился ряд существенных поправок и улучшений исходного текста.

Русское издание следует тексту первого английского издания, однако в него внесены многие исправления выявленных позже ошибок и опечаток.

Мы надеемся, что «освоение атомной физики» доставит читателю удовольствие!

*Авторы*

## ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА И РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Мы взялись за работу над русским изданием этой книги после ее беглого просмотра — она нам показалась подозрительно любопытной. Однако, впечатления от дальнейшего более глубокого знакомства с ней, неизбежного при ее переводе и редактировании, превзошли все наши подозрения. Книга и вправду оказалась удивительной. Она совершенно оригинальна и по стилю изложения, и по структуре, и по выбору материала. В ней каждая задача — это отдельная новелла со своей интригой, своим сюжетом и своей развязкой. Здесь нет задач вычислительных, все задачи «понимательные». Чтобы написать такую книгу, надо очень любить физику. И авторы действительно безоглядно покорены логикой, красотой и гармоничным многообразием явлений атомной физики и предлагают разделить свои знания и чувства с читателем.

Книга совершенно уникальна и по числу выбранных сюжетов и по их «номенклатуре». При своем вполне обозримом объеме она умудряется охватить, пожалуй, все физически содержательные эффекты современной атомной физики и оптики. Объясняется это просто — книга написана талантливыми исследователями и талантливыми педагогами.

Основное достоинство книги, на наш взгляд, состоит в ее нацеленности на развитие физической интуиции, на проникновение в суть явлений и их взаимосвязь. Это особенно важно в наше время стремительного обучения и карьерного роста, когда молодые специалисты-физики достигают заоблачных высот науки, не успев освоиться на твердой почве установившихся физических знаний. Мы не сомневаемся, что эта книга будет интересна и маститым ученым всех калибров. Это — настоящая живая физика. По крайней мере, мы, работая над ней, получили истинное наслаждение. Надеемся, что читателя это еще ждет.

*д-р физ.-мат. наук В. С. Запасский  
академик Е. Б. Александров*



## ВВЕДЕНИЕ

Мы обнаружили, что наилучший способ изучить что-то новое — это задавать конкретные вопросы и пытаться выработать на них ответы. Зачастую ответы на простые вопросы оказываются неожиданными и удивительными, так что кажущиеся сложными задачи могут быть решены простым способом. В этой книге мы собрали некоторые задачи такого рода, снабдив их нашими решениями. Книга охватывает многие вопросы, с которыми мы сталкивались по мере нашей собственной эволюции от студентов к практикующим экспериментаторам и педагогам в области атомной физики. Изложение, однако, не предполагалось сделать исчерпывающим. Скорее, здесь рассматриваются различные аспекты атомной физики, которые показались нам важными и интересными.

Работая в области атомной физики, мы часто оказываемся в пограничных разделах знаний — подбор задач отражает этот факт. Он также отражает наши специфические пристрастия, как, например, в случае задач по нарушению симметрии, которые трудно найти в более «стандартных» курсах. Идеология нашего подхода состоит в том, что работа над конкретными задачами часто помогает понять более общие проблемы и может оказаться самым эффективным способом чему-то действительно научиться. Мы надеемся, что предложенный здесь широкий выбор задач подогреет заинтересованность читателей и стимулирует процесс обучения.

Везде, где это возможно, мы стараемся обращать внимание на приближенные методы, предельные случаи, соображения размерности и симметрии, предпочитая их формальной математике. Мы стараемся часто апеллировать к рисункам, таблицам, графикам. Такой подход к решению задач нацелен на развитие интуиции и важной способности делать прикидки «на салфетке». Эти инструменты наиболее полезны при решении задач, с которыми мы обычно сталкиваемся в научной лаборатории. Разумеется, в некоторых случаях формальное математическое описание, в меру мучительное, может оказаться важным для понимания. Для того чтобы глубже проникнуть в различные аспекты физики, полезно, вообще говоря, иметь и интуитивное представление и, одновременно, располагать соответствующими математическими инструментами.

Книга предназначена для продвинутых студентов и аспирантов первых лет обучения, интересующихся атомной, молекулярной и оптической физикой. Предполагается, что читатель знаком с базовыми понятиями квантовой механики (на уровне [Griffiths (1995), Bransden и Joachain (1989)], или подобных учебников), электродинамики (на уровне [Griffiths (1999), Purcell (1985)] и подобных учебников) и термодинамики (на уровне [Reif (1965), Kittel и Kroemer (1980)] или равноценных изданий). Мы, однако, надеемся, что многие задачи будут также интересны и профессиональным научным работникам.

Физики до сих пор продолжают яростно спорить о том, какая система единиц наилучшая и следует ли стандартизировать единицы измерения. Нам представляется, что выбор единиц — дело вкуса, тем более, что переход от одной системы единиц

к другой вполне однозначен. В этой книге, в частности, мы, в основном, используем систему единиц СГСЭ, которая нам кажется наиболее удобной (в особенности в задачах, касающихся электромагнетизма). Мы также принимаем, когда это удобно,  $\hbar = 1$  и измеряем энергию в единицах частоты, что является общепринятым в атомной физике (поскольку энергия обычно определяется путем измерения частоты).

Каждая задача этой книги имеет свое предназначение. Если читатель предметно интересуется каким-либо вопросом из атомной физики, он вполне может найти в этой книге соответствующую задачу. Мы предвидим, что читатель сразу откроет нужную страницу и попытается разобраться в этой задаче. Мы надеемся, что в результате таких упражнений читатель получит определенное представление о предмете, что позволит ему читать более специализированную литературу или прямо идти в лабораторию и приступать к работе.

Большинство задач снабжено предварительным обсуждением связей данной темы с современной атомной физикой и ссылками на соответствующие публикации. Мы заранее приносим извинения множеству исследователей, чей важный вклад оказался не упомянутым. Некоторые задачи, в особенности из близких нам разделов атомной физики, снабжены историческими комментариями. Разумеется, историческая подоплека имеется практически у всех тем, затронутых в этой книге, и мы не могли осветить эту сторону во всех случаях. Тем не менее, мы полагаем, что некоторые, не слишком известные истории развлекут читателя.

Некоторые из задач написаны как учебные иллюстрации к определенным разделам атомной физики (они помечены знаком «У»). Эти задачи содержат последовательности коротких вопросов, служащих путеводителем по некоторым важным разделам. Мы полагаем, что такая форма диалога с читателем окажется более эффективной, чем чтение прямолинейных разъяснений.

Мы надеемся, что читатель получит от чтения книги такое же удовольствие, как мы от ее написания.

Д. Б.  
Д. Ф. К.  
Д. П. Д.

Беркли, Калифорния,  
май 2003

## ОБОЗНАЧЕНИЯ

Ниже представлен список использованных в книге символов, их смысла и, где это уместно, их числовых значений. В большинстве случаев мы напоминаем читателю смысл обозначений, когда они вводятся. См. также Приложение А, содержащее применяющиеся на практике единицы, коэффициенты преобразования единиц и типичные значения разных параметров.

Символ	Значение	Величина
$m, m_e$	масса электрона	$9,1094 \cdot 10^{-28}$ г $0,511$ МэВ/ $c^2$
$m_p$	масса протона	$1,6726 \cdot 10^{-24}$ г $938,28$ МэВ/ $c^2$
$m_n$	масса нейтрона	$1,6750 \cdot 10^{-24}$ г $939,57$ МэВ/ $c^2$
$m_n - m_p$	разница масс нуклонов	$1,293$ МэВ/ $c^2$
$e$	заряд электрона	$4,8032 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ
$h$	постоянная Планка	$6,6261 \cdot 10^{-27}$ эрг · с
$\hbar = h/(2\pi)$		$1,0546 \cdot 10^{-27}$ эрг · с
$c$	скорость света	$2,99\,792\,458 \cdot 10^{10}$ см · с <sup>-1</sup>
$\alpha = e^2/(\hbar c)$	постоянная тонкой структуры	$1/137,036$
$\alpha_0 = \hbar^2/(me^2)$	Боровский радиус	$5,292 \cdot 10^{-9}$ см
$\mu_0 = e\hbar/(2mc)$	магнетон Бора	$0,93 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс $1,40$ МГц/Гс
$\mu_n = e\hbar/(2m_p c)$	ядерный магнетон	$5,05 \cdot 10^{-24}$ эрг/Гс $762$ Гц/Гс
$R_\infty = me^4/(4\pi\hbar^3 c)$	постоянная Ридберга	$109\,737$ см <sup>-1</sup>
$k_B$	постоянная Больцмана	$1,38066 \cdot 10^{-16}$ эрг/К $8,61735 \cdot 10^{-5}$ эВ/К
$L, l$	орбитальный угловой момент	в единицах $\hbar$
$S, s$	электронный спин	в единицах $\hbar$
$J, j$	полный электронный угловой момент	в единицах $\hbar$
$I$	ядерный спин	в единицах $\hbar$
$F$	полный атомный угловой момент	в единицах $\hbar$

Для систем со спином  $1/2$  мы будем использовать обозначения  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$  для состояний со спином вверх ( $m = +1/2$ ) и вниз ( $m = -1/2$ ) соответственно. Здесь  $m$  обозначает проекцию спина на ось квантования.

Вездесущие коэффициенты Клебша–Гордона <sup>1)</sup> описывают соотношения между базисами связанных  $|J, M\rangle$  и несвязанных  $|J_1, M_1\rangle |J_2, M_2\rangle$  состояний (где  $J, J_1, J_2$  и  $M, M_1, M_2$  обозначают угловые моменты и их проекции на ось квантования):

$$|J, M\rangle = \sum_{M_1, M_2} C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) |J_1, M_1\rangle |J_2, M_2\rangle, \quad (1)$$

$$|J_1, M_1\rangle |J_2, M_2\rangle = \sum_{J, M} C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) |J, M\rangle. \quad (2)$$

В тексте мы последовательно пользуемся обозначением:

$$C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) \equiv \langle J_1, M_1, J_2, M_2 | J, M \rangle, \quad (3)$$

и используем соглашение о фазах, принятое в монографиях Condon и Shortley (1970), Edmonds (1996), и Sobelman (1992).

---

<sup>1)</sup> Коэффициенты Клебша–Гордона в литературе называются также *коэффициентами векторной связи*, *коэффициентами векторного сложения* и *коэффициентами Вигнера*.

# Глава 1

## СТРУКТУРА АТОМА

### 1.1. Основное состояние атома фосфора

Одна из важнейших тем в атомной физике связана с описанием уровней энергии атома. Изучение атомной структуры по-прежнему привлекает к себе интерес в связи с непрерывно растущей точностью измерений и развитием методов расчета, позволяя все более детально сопоставлять теорию с экспериментом.

Первые задачи этой главы касаются некоторых фундаментальных свойств энергетической структуры многоэлектронных атомов. Для простейшего атома — водорода — структура энергетических уровней определяется главными квантовыми числами  $n$  различных состояний, энергия  $E_n$  электрона в атоме водорода приблизительно описывается знаменитой формулой Бора

$$E_n \approx -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (1.1)$$

где  $m$  — масса электрона и  $e$  — абсолютное значение его заряда. Для более сложных атомов можно полагать, что движение отдельных электронов происходит в эффективном центрально-симметричном поле, образованном ядром и остальными электронами (приближение *центрального поля*). В этом случае мы можем приписать главное квантовое число  $n$  и орбитальный угловой момент  $l$  каждому электрону (распределение электронов по состояниям с различными  $n$  и  $l$  называется *электронной конфигурацией*), и, как и в атоме водорода, различия между главными квантовыми числами для различных конфигураций вносят важный вклад в энергетические расщепления уровней. Однако в многоэлектронных атомах, в отличие от атома водорода, энергия заданной электронной конфигурации зависит также и от  $l$ . Это вызвано тем, что электроны с большими значениями  $l$  находятся в среднем дальше от ядра благодаря центробежному барьеру, вследствие чего остальные электроны экранируют заряд ядра. Основываясь на этих двух общих соображениях, можно ожидать, что конфигурации с минимально возможными значениями  $n$  и  $l$  обладают минимальной энергией. Действительно, для  $s$ - и  $p$ -орбиталей нижайшие по энергии состояния реализуются при минимальных  $n$  («стандартные» конфигурации). Однако в некоторых случаях  $d$ - и  $f$ -орбиталей для электронов может оказаться энергетически выгодней иметь большее значение  $n$ , с тем чтобы занять состояние с меньшим  $l$  («нестандартные» конфигурации <sup>1)</sup>).

---

<sup>1)</sup> Примером такой нестандартной конфигурации служит основное состояние калия —  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$  вместо  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d$ .

Далее следует учитывать взаимное электростатическое отталкивание электронов. Приближение центрального поля уже учитывает сферически-симметричную часть этого взаимодействия, ответственную за экранирование ядра. Существует также сферически-несимметричная часть электрон-электронного потенциала, обусловленная стремлением электронов находиться как можно дальше друг от друга.

Для заданной конфигурации состояние атома может быть описано полным орбитальным угловым моментом  $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$  и полным спином  $S = \sum \vec{s}_i$  (такое описание атомных состояний, справедливое для атомов с малым или промежуточным значением  $Z$ , известно под названием  $L$ - $S$  или рассел-саундеровской связи <sup>1)</sup>). Поскольку средние расстояния между электронами различны для состояний с различными  $L$  и  $S$ , эти состояния расщеплены по энергии (см. задача 1.2). Состояние с конфигурацией, характеризуемой определенными значениями  $L$  и  $S$ , называют *термом*.

Существуют эмпирические правила, известные как *правила Хунда* (см., например, [Bransden и Joachain (2003), Landau и Lifshitz (1977)], или [Herzberg (1944)]), позволяющие определить, какой терм обладает нижайшей энергией для данной конфигурации (в рассел-саундеровской схеме связи). Правила Хунда утверждают, что

1) энергия терма уменьшается с увеличением  $S$  (так что терм с наибольшим  $S$  обладает минимальной энергией) и

2) при заданном  $S$  энергия терма уменьшается с ростом полного орбитального момента  $L$ .

Эти правила отражают тот факт, что электроны в основном состоянии, в среднем, располагаются на максимальных расстояниях друг от друга, что минимизирует их электростатическое расталкивание <sup>2)</sup>.

В одно- и многоэлектронных атомах участвует также спин-орбитальное взаимодействие (см. задачу 1.3), которое вызывает расщепление состояний с различными значениями полного углового момента  $J$  (сумма спина  $S$  и орбитального момента  $L$ ). Поскольку это расщепление обычно значительно меньше, чем разности энергий, обусловленные механизмами, обсужденными выше, его называют *тонкой структурой*.

Обычно  $S$ ,  $L$  и  $J$  для конкретного состояния обозначаются с использованием спектроскопической нотации (см., например, Приложение С):

$$^{2S+1}L_J. \quad (1.2)$$

<sup>1)</sup> Для атомов с большим значением  $Z$  энергия спин-орбитального взаимодействия (обусловленная релятивистскими эффектами) может стать более существенной, чем остаточное — несферическое — электростатическое взаимодействие между электронами. В этом случае удобно характеризовать индивидуальные электронные состояния полным угловым моментом  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  — так называемая схема  $j$ - $j$  связи. Однако следует иметь в виду, что в общем случае обе эти схемы связи являются приближенными и не позволяют найти точные волновые функции.

<sup>2)</sup> Как нам любезно указал профессор G. A. Brooker, в задачах 1.1 и 1.2 мы преувеличили область применения правил Хунда. Строго говоря, эти правила пригодны для нахождения нижайшего терма конфигурации основного состояния и при наличии только одной незаполненной оболочки. Сказанное, впрочем, не влияет на справедливость выводов, сделанных в задачах 1.1 и 1.2.

В этой задаче мы рассматриваем все упомянутые взаимодействия, чтобы определить энергетическую структуру уровней для термов, соответствующих конфигурации основного состояния атома фосфора (P).

**(а)** Какова конфигурация основного состояния P ( $Z = 15$ )?

**(б)** Каковы, в соответствии с правилами Хунда, основной терм и величина  $J$  атома фосфора?

**(в)** Какие иные термы возможны для электронной конфигурации основного состояния? Какой из них обладает максимальной энергией?

**(г)** В развитие пункта (в), какой величине  $J$  соответствует максимальная энергия (в рамках первого приближения теории возмущений)?

### Подсказки

В пункте (б) можно воспользоваться тем обстоятельством, что электроны в заполненных оболочках ( $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ) имеют полный спин и полный орбитальный угловой момент, равные нулю, а потому для определения основного терма достаточно рассмотреть только три внешних электрона  $3p$ -орбитали.

Для основного терма для начала следует определить максимальный спин и максимальную проекцию спина трех электронов на ось квантования (по правилу Хунда эта проекция должна быть, очевидно, равна спину  $S$ ). Какова в этом случае должна быть орбитальная волновая функция?

Пункт (г) — с подвохом! Можно рассматривать оболочку (которая вмещает вплоть до  $2(2l + 1)$  электронов) как содержащую  $N$  электронов или  $2(2l + 1) - N$  дырок. Спин-орбитальное расщепление имеет в первом приближении различный знак для электронов и дырок.

### Решение

**(а)** Значение  $Z$  для атома фосфора достаточно мало, так что электронные оболочки заполняются последовательно (т.е. состояния  $f$  и  $d$  не заполняются). Внешняя оболочка может содержать до  $2(2l + 1)$  электронов, где  $l$  — квантовое число орбитального углового момента для отдельного электрона. Следовательно, электронная конфигурация основного состояния выглядит следующим образом:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3. \quad (1.3)$$

**(б)** Максимальный полный спин трех электронов  $S = 3/2$ . Волновая функция состояния  $S = 3/2$  симметрична относительно перестановки электронов. Это следует из того факта, что «вытянутое» состояние  $|S, M_s = S\rangle$  с очевидностью симметрично:

$$|3/2, 3/2\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2 |+\rangle_3, \quad (1.4)$$

и все другие состояния с полным спином  $S = 3/2$  могут быть получены с помощью понижающего оператора  $S_- = S_{1-} + S_{2-} + S_{3-}$ , который симметричен и не может изменить перестановочную симметрию спиновых состояний.

Чтобы удовлетворить *закону спиновой статистики*<sup>1)</sup> необходимо выбрать пространственную волновую функцию, полностью антисимметричную по отношению к перестановке частиц. Для трех  $p$  электронов  $l = 1$ , что позволяет их суммарному орбитальному моменту  $L$  иметь значения 3, 2, 1 и 0. Однако чтобы построить полностью антисимметричную волновую функцию, нужно иметь, по крайней мере, такое же число состояний, как и частиц. В этом можно убедиться из рассмотрения *детерминанта Слетера* (см., например, [Bransden и Joachain (2003)]), который предоставляет простой метод нахождения полностью антисимметричной волновой функции системы частиц. В данном случае мы имеем три частицы в состояниях, скажем,  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . Тогда полностью антисимметричная функция имеет вид:

$$\Psi_{AS} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \alpha(1) & \beta(1) & \gamma(1) \\ \alpha(2) & \beta(2) & \gamma(2) \\ \alpha(3) & \beta(3) & \gamma(3) \end{vmatrix}. \quad (1.5)$$

Эта волновая функция очевидно антисимметрична по отношению к перестановкам, поскольку перестановка двух частиц эквивалентна перестановке строк матрицы, что изменяет знак детерминанта. Более того, детерминант обращается в ноль, если два столбца равны, что происходит, когда любые два состояния из набора  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  идентичны. Таким образом видно, что *принцип Паули* является следствием того факта, что электроны должны находиться в перестановочно-антисимметричных состояниях.

Таким образом, для  $S = 3/2$  разрешенная пространственная волновая функция  $|\psi_{\text{space}}\rangle$  должна включать суперпозицию электронных состояний с  $m_l = 1$ ,  $m_l = 0$  и  $m_l = -1$ , (обозначенных далее как  $|1\rangle$ ,  $|0\rangle$ ,  $|-1\rangle$ ). Используя (1.5), имеем:

$$|\psi_{\text{space}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[ |1\rangle_a |0\rangle_b |-1\rangle_c + |0\rangle_a |-1\rangle_b |1\rangle_c + |-1\rangle_a |1\rangle_b |0\rangle_c - \right. \\ \left. - |-1\rangle_a |0\rangle_b |1\rangle_c - |1\rangle_a |-1\rangle_b |0\rangle_c - |0\rangle_a |1\rangle_b |-1\rangle_c \right], \quad (1.6)$$

так что полная проекция орбитального углового момента  $M_L$  на ось  $z$  равна нулю. При этом единственно возможное значение орбитального углового момента  $L = 0$ .

Имеется другой простой графический способ придти к тому же выводу. Рассмотрим таблицу, представленную на рис. 1.1. Каждая ячейка соответствует одному из трех электронов со своим набором квантовых чисел. Мы хотим описать «вытянутое» состояние с максимальным  $S$ . Запрет Паули требует, чтобы в каждой ячейке помещался только один электрон (поскольку иначе состояние не может быть перестановочно-антисимметричным). Мы помещаем все электроны в ячейки  $m_s = 1/2$ , чтобы обеспечить максимальное значение  $M_S$  и, тем самым,  $S$ . Тогда максимальное

<sup>1)</sup> Имеется важное различие между *постулатом симметризации* и *законом спиновой статистики*. Постулат симметризации утверждает, что волновая функция системы тождественных частиц должна быть либо симметричной, либо антисимметричной по отношению к перестановке частиц (т.е., волновая функция должна быть собственной функцией перестановочного оператора). Закон спиновой статистики утверждает, что частицы с целым спином (бозоны) должны находиться в перестановочно-симметричном состоянии, а частицы с полуцелым спином (фермионы) — в антисимметричном состоянии.



значение проекции  $M_L$ , совместимое с  $M_S = 3/2$ , равно нулю. Это означает, что для основного состояния фосфора  $L = 0$ .

$m_l \backslash m_s$	1	0	-1
+1/2	•	•	•
-1/2			

$M_L = 0, M_S = 3/2$

Рис. 1.1. Простой способ определения терма основного состояния атома фосфора с помощью правил Хунда

Последний шаг — определить значение  $J$ . К счастью, в этом случае есть только один выбор —  $J = 3/2$ . Следовательно, основное состояние фосфора имеет вид:

$$\boxed{^4S_{3/2}}. \quad (1.7)$$

**(в)** Как мы видели в пункте (б),  $^4S_{3/2}$  — это единственное состояние с полным электронным спином  $S = 3/2$ . Но три электрона могут также иметь полный спин  $S = 1/2$ , так что в этой конфигурации существуют дополнительные термы с более высокой энергией. В отличие от  $S = 3/2$  спиновых волновых функций, которые являются перестановочно-симметричными, спиновые волновые функции с  $S = 1/2$  не обладают определенной перестановочной симметрией. Поэтому использованный в пункте (б) подход, где из перестановочной симметрии спиновых волновых функций вытекала перестановочная симметрия орбитальных функций, перестает быть правомочным. Чтобы сконструировать полностью антисимметричные волновые функции трех электронов для этих более энергичных термов, необходимо рассмотреть произведение пространственных и спиновых состояний для каждого отдельного электрона.

Как отмечалось при обсуждении (1.5), чтобы построить полностью антисимметричную волновую функцию, нужно иметь, по крайней мере, такое же число состояний, как и частиц. Чтобы определить дополнительные термы нужно выписать все возможные состояния, используя сокращенную запись

$$(m_l^{m_s})_a(m_l^{m_s})_b(m_l^{m_s})_c,$$

которая относится к полностью антисимметричной волновой функции, сконструированной из трех состояний в соответствии с (1.5). Чтобы удовлетворить запрету Паули, нужно потребовать чтобы никакие два состояния трех электронов не совпадали. Эта запись эквивалентна таблице, описанной в пункте (б) — таблица, показанная на рис. 1.1, соответствует  $(1^+)(0^+)(-1^+)$ . Теперь мы можем составить таблицу всех возможных состояний, сгруппированных по проекциям их полных орбитальных угловых моментов  $M_L$  и по проекциям их полного спина  $M_S$  (табл. 1.1).

Состояния, описанные в табл. 1.1, являются собственными состояниями операторов  $L_z$  и  $S_z$ , так что, формируя соответствующие линейные комбинации, можно построить собственные состояния операторов  $L^2$ ,  $S^2$ ,  $L_z$  и  $S_z$ . Состояния, соответствующие данному терму, являются собственными состояниями операторов  $\{L^2, S^2, J^2, J_z\}$ . Поскольку оба набора собственных состояний образуют полный базис для нашей

Таблица 1.1

Все возможные одночастичные состояния для конфигурации основного состояния фосфора, сгруппированные по  $M_L$  и  $M_S$ . Для полноты выписаны все состояния, но ввиду симметрии состояний с  $M_L$  и  $-M_L$ , как и состояний с  $M_S$  и  $-M_S$ , только один угол таблицы фактически достаточен для описания всех состояний

$M_S$	$M_L = 2$	$M_L = 1$	$M_L = 0$	$M_L = -1$	$M_L = -2$
$+\frac{3}{2}$			$(1^+)(0^+)(-1^+)$		
$+\frac{1}{2}$	$(1^+)(0^+)(1^-)$	$(1^+)(-1^+)(1^-)$ $(1^+)(0^+)(0^-)$	$(-1^+)(0^+)(1^-)$ $(-1^+)(1^+)(0^-)$ $(1^+)(0^+)(-1^-)$	$(1^+)(-1^+)(-1^-)$ $(1^+)(0^+)(0^-)$	$(-1^+)(0^+)(-1^-)$
$-\frac{1}{2}$	$(1^+)(0^-)(1^-)$	$(1^+)(-1^-)(1^-)$ $(0^+)(1^-)(0^-)$	$(-1^+)(0^-)(1^-)$ $(1^+)(-1^-)(0^-)$ $(0^+)(1^-)(-1^-)$	$(-1^+)(1^-)(-1^-)$ $(0^+)(-1^-)(0^-)$	$(-1^+)(0^-)(-1^-)$
$-\frac{3}{2}$			$(1^-)(0^-)(-1^-)$		

системы, то в каждом наборе имеется одно и то же число собственных состояний. Чтобы описать дополнительные термы, возможные для конфигурации основного состояния, начнем с «вытянутого» состояния (характеризуемого максимально возможными проекциями орбитального и спинного моментов:  $M_L = L$  и  $M_S = S$ ) для выделенного терма и подсчитаем число состояний в этом терме. Мы будем продолжать этот процесс, пока не учтем все 20 состояний табл. 1.1.

Начнем с уже знакомого нам терма  $^4S$ . В этом терме 4 состояния (так как  $J = 3/2$ ), все с  $M_L = 0$ , которые входят в колонку  $M_L = 0$  нашей таблицы. Далее, можно видеть, что существует одно состояние  $[(1^+)(0^+)(1^-)]$  с  $M_L = 2$  и  $M_S = 1/2$ . Это «вытянутое» состояние  $^2D$  терма. Возможные состояния для полного электронного углового момента  $J$  этого терма соответствуют  $J = 5/2$  и  $J = 3/2$ , так что  $^2D$  содержит 10 состояний (шесть с  $J = 5/2$  и четыре с  $J = 3/2$ ), два в каждом  $M_L$ -столбце, отвечающие значениям  $M_S = \pm 1/2$  (поскольку для терма  $^2D$  полный спин  $S = 1/2$ ).

Имеется также состояние с  $M_L = 1$  и  $M_S = 1/2$ , не включенное в термы  $^4S$  и  $^2D$ . Это «вытянутое» состояние (состояние с максимально возможной проекцией всех угловых моментов на ось квантования) терма  $^2P$ , который охватывает остальные шесть состояний (для  $^2P$  — терма  $J = 3/2$  и  $J = 1/2$ ). Таким образом, полный набор термов основного состояния атома фосфора имеет вид:

$$\boxed{{}^4S, {}^2D, \text{ и } {}^2P.} \quad (1.8)$$

Отвечая на вопрос о том, какой терм в этой конфигурации обладает максимальной энергией, следует использовать правила Хунда. Максимальной энергией должен обладать терм с минимальными значениями  $S$  и  $L$ . Это терм  $^2P$ .

**(г)** Как отмечено в подсказке, в первом приближении спин-орбитальное взаимодействие имеет противоположные знаки для электронов и дырок.

Поскольку конфигурация  $p^3$  может рассматриваться либо как состоящая из трех дырок, либо из трех электронов, мы видим, что энергетическое расщепление  $\Delta E_{LS}$ , вызванное спин-орбитальным взаимодействием, удовлетворяет условию

$$\Delta E_{LS} \approx -\Delta E_{LS}, \quad (1.9)$$

так что

$$\boxed{\Delta E_{LS} \approx 0}. \quad (1.10)$$

Итак, в первом приближении состояния  $^2P_{1/2}$  и  $^2P_{3/2}$  имеют одинаковую энергию<sup>1)</sup>.

## 1.2. Обменное взаимодействие

В нерелятивистском пределе гамильтониан, описывающий взаимодействие электронов с ядром, не зависит от их спинов. Тем не менее, как мы видели в задаче 1.1, энергии уровней многоэлектронных атомов так зависят от спинового состояния электрона. Рассмотрим двухэлектронный атом. Нерелятивистский гамильтониан  $H$  имеет вид:

$$H = H_0 + H_1, \quad (1.11)$$

где

$$H_0 = - \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_i}^2 + \frac{Ze^2}{r_i} \right) \quad (1.12)$$

и

$$H_1 = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (1.13)$$

Здесь  $H_0$  учитывает кулоновское притяжение электронов к ядру и  $H_1$  — кулоновское расталкивание электронов;  $\vec{r}_i$  характеризует положение  $i$ -го электрона и  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  — расстояние между электронами.

Полная волновая функция  $\Psi$  электрона является произведением пространственной волновой функции  $\psi$  и спиновой функции  $\chi$ . Статистика Ферми требует антисимметричности функции  $\Psi$  по отношению к перестановке неразличимых частиц с полуцелым спином. Таким образом, если  $\chi$  соответствует триплетному состоянию (симметричному), то  $\psi$  должна быть антисимметрична; если спиновое состояние  $\chi$  синглетно (антисимметрично), тогда  $\psi$  должна быть функцией симметричной. Так электронный спин диктует симметрию пространственной части волновой функции. Оказывается, что вследствие кулоновского расталкивания электронов ( $H_1$ ), симметричные и антисимметричные пространственные волновые функции имеют различные энергии. Это различие связывают с так называемым *обменным взаимодействием* (см., например, [Griffiths (1995)] или [Landau и Lifshitz (1977)]).

**(а)** Пусть один электрон находится в основном состоянии, а другой в возбужденном, с квантовыми числами  $(n, l, m_l)$ . Какое из спиновых состояний — синглетное

<sup>1)</sup> Этот вывод в той же мере справедлив и по отношению к спин-орбитальному расщеплению остальных термов основного состояния. — *Примеч. ред.*

или триплетное — будет иметь большую энергию? Как это соотносится с правилами Хунда (рассмотренными в задаче 1.1)?

**(б)** В качестве простой иллюстрации обменного взаимодействия рассмотрим два электрона в одномерной потенциальной яме, отвечающей гармоническому осциллятору. Для случая, когда один из электронов находится в основном состоянии, а другой — в первом возбужденном, рассчитать средний квадрат расстояния между электронами  $\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle$  для триплетного и синглетного спиновых состояний ( $x_1$  и  $x_2$  — координаты двух электронов).

### Решение

**(а)** Рассмотрим случай, когда один электрон находится в основном состоянии  $\psi_{100}(\vec{r}_1)$ , а другой электрон — в возбужденном состоянии  $\psi_{nlm}(\vec{r}_2)$ . Симметричная  $\psi_s$  и антисимметричная  $\psi_a$  пространственные волновые функции даются выражениями

$$\begin{aligned}\psi_s &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{r}_1) \cdot \psi_{nlm}(\vec{r}_2) + \psi_{100}(\vec{r}_2) \cdot \psi_{nlm}(\vec{r}_1)], \\ \psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{r}_1) \cdot \psi_{nlm}(\vec{r}_2) - \psi_{100}(\vec{r}_2) \cdot \psi_{nlm}(\vec{r}_1)].\end{aligned}\quad (1.14)$$

Если электроны находятся в состоянии  $\psi_a$ , они никогда не могут занимать одно и то же положение, поскольку если  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$  то  $\psi_a = 0$ . Однако,  $\psi_s \neq 0$  при  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ , так что нахождение двух электронов в одной точке является допустимым. Оказывается, что в среднем электроны в состоянии  $\psi_s$  располагаются ближе друг к другу, чем электроны в состоянии  $\psi_a$ . По этой причине  $H_1$  обеспечивает состоянию с симметричной пространственной волновой функцией более высокую энергию, чем состоянию с антисимметричной волновой функцией, так что синглетные спиновые состояния ( $\chi$  антисимметричная  $\rightarrow \psi$  симметричная) обладают большей энергией, чем триплетные состояния ( $\chi$  симметричная  $\rightarrow \psi$  антисимметричная). Основываясь на таком рассуждении, мы, по-видимому, можем утверждать, что термы с более высоким значением полного спина  $S$  имеют более низкую энергию, поскольку их пространственные волновые функции «более антисимметричны», что ведет к уменьшению пространственного перекрытия электронных волновых функций. Это является физическим основанием первого правила Хунда.

**(б)** Этот принцип можно проиллюстрировать более убедительно путем рассмотрения математического ожидания  $\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle$  для двух электронов в простом 1D (одномерном) гармоническом осцилляторе (1D ПГО). Для 1D ПГО собственные состояния энергии  $|n\rangle$  характеризуются собственными значениями  $\hbar\omega(n + 1/2)$ . Допустим, что один электрон находится в основном состоянии  $|0\rangle$ , а другой — в первом возбужденном состоянии  $|1\rangle$ . Для электронов в триплетном спиновом состоянии пространственная волновая функция должна быть перестановочно-антисимметричной:

$$|\psi_a\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2), \quad (1.15)$$

тогда как для синглетного спинового состояния пространственная волновая функция должна быть перестановочно-симметричной:

$$|\psi_s\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2). \quad (1.16)$$

Мы можем оценить математическое ожидание расстояния между электронами, выразив операторы координаты через повышающие и понижающие операторы для двух электронов (см., например, [Griffiths (1995)]):

$$\hat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger), \quad (1.17)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |n\rangle_i &= \sqrt{n} |n-1\rangle_i, \\ \hat{a}_i^\dagger |n\rangle_i &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle_i. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Для оператора, описывающего расстояние между электронами, мы находим

$$(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2 = \hat{x}_1^2 - 2\hat{x}_1\hat{x}_2 + \hat{x}_2^2, \quad (1.19)$$

где, используя (1.17), получаем

$$\hat{x}_i^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}_i\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i + \hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i^\dagger), \quad (1.20)$$

$$\hat{x}_1\hat{x}_2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}_1\hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 + \hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger). \quad (1.21)$$

Используя приведенные соотношения, легко показать, что

$$\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle_{\text{триплет}} = \frac{3\hbar}{m\omega}, \quad (1.22)$$

причем

$$\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle_{\text{синглет}} = \frac{\hbar}{m\omega}. \quad (1.23)$$

Таким образом, мы видим, что, действительно, электроны в триплетных спиновых состояниях, в среднем, располагаются значительно дальше друг от друга, чем в синглетных состояниях.

### 1.3. Спин-орбитальное взаимодействие

После электростатического притяжения электронов к ядру и электростатического расталкивания электронов (задачи 1.1 и 1.2) следующая важная причина расщеплений уровней энергии в атомах с низкими значениями  $Z$  связана с релятивистскими эффектами, ответственными за так называемую *тонкую структуру* атомных спектров.

Для низко расположенных состояний атома водорода расщепление тонкой структуры приблизительно в  $\alpha^2$  раз меньше боровской энергии (см. формулу (1.1)). Существует две причины таких расщеплений: (1) взаимодействие магнитного момента электронов с эффективным магнитным полем, которое электроны видят вследствие их движения вокруг ядра, и (2) релятивистские поправки к кинетической и потенциальной энергии электронов. В следующей задаче мы рассматриваем только расщепление, связанное со спин-орбитальным взаимодействием (1), которое является основной причиной расщепления тонкой структуры в более тяжелых атомах.

Рассмотрим терм  ${}^5D$  многоэлектронного атома.

**(а)** Каковы возможные значения  $J$ ?

**(б)** Изобразить на диаграмме энергетических уровней расщепление терма  ${}^5D$ , обусловленное спин-орбитальным взаимодействием. Указать значения  $J$  и энергии в единицах  $A$ , учитывая, что гамильтониан спин-орбитального взаимодействия имеет вид <sup>1)</sup>

$$H' = A \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (1.24)$$

Будем считать, что константа  $A$  положительна, что справедливо для оболочек, заполненных менее, чем наполовину.

**(в)** Какое влияние оказывает спин-орбитальное взаимодействие на положение «центра тяжести» уровней (каково среднее возмущение всех уровней терма)?

### Подсказки

Для пункта **(в)** полезными могут оказаться следующие формулы суммирования (доказываются методом индукции):

$$\sum_{J=0}^N J = \frac{1}{2} N(N+1), \quad (1.25)$$

$$\sum_{J=0}^N J^2 = \frac{1}{6} N(N+1)(2N+1), \quad (1.26)$$

и

$$\sum_{J=0}^N J^3 = \frac{1}{4} N^2(N+1)^2. \quad (1.27)$$

---

<sup>1)</sup> В многоэлектронном атоме «одноэлектронное» спин-орбитальное взаимодействие (означающее, что взаимодействие спина одного электрона с орбитальным движением другого не учитывается, что является хорошим приближением для элементов, расположенных в середине и в конце периодической таблицы) описывается выражением

$$H' = \sum_i a \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i.$$

Полагая, что спин-орбитальное взаимодействие мало по сравнению с электростатическим отталкиванием электронов, можно считать применимой схему рассел-саундеровской связи (см. задачу 1.1), и в первом порядке теории возмущений мы должны вычислить только диагональные матричные элементы  $\langle L, S, J, M_J | H' | L, S, J, M_J \rangle$ . Определяя интегральный сдвиг атомного состояния с полным орбитальным угловым моментом  $\vec{L}$  и полным спином  $\vec{S}$ , мы заметим, что *средний* орбитальный угловой момент  $\vec{L}$  электрона в таком состоянии пропорционален  $\vec{L}$ , а *средний* спин  $\vec{s}$  пропорционален  $\vec{S}$  (следствие теоремы Вигнера–Экарта, см. Приложение F), что позволяет нам записать  $H'$  так, как это сделано в (1.24) (см., например, [Condon и Shortley (1970)] или [Landau и Lifshitz (1977)]).

**Решение**

(а) Здесь мы используем общее правило сложения угловых моментов  $\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$ :

$$|L - S| \leq J \leq L + S, \quad (1.28)$$

известное как неравенство треугольника. Используя (1.28), мы находим возможные значения  $J$ :

$$\boxed{{}^5D: S = 2, L = 2 \rightarrow J = 4, 3, 2, 1, 0.} \quad (1.29)$$

(б) Для полного углового момента  $J$  справедливо соотношение

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}. \quad (1.30)$$

Возводя в квадрат обе части, получаем

$$J^2 = S^2 + L^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (1.31)$$

Таким образом, гамильтониан спин-орбитального взаимодействия приобретает вид

$$H' = \frac{A}{2}(J^2 - S^2 - L^2). \quad (1.32)$$

Состояния термов  ${}^{2S+1}L_J$  являются собственными состояниями операторов  $J^2$ ,  $S^2$  и  $L^2$ . Следовательно, они также являются собственными состояниями оператора  $H'$  с собственными значениями

$$\Delta E = \frac{A\hbar^2}{2}[J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)]. \quad (1.33)$$

Используя (1.33) и полагая  $\hbar = 1$ , мы можем оценить энергетические сдвиги для состояний с различными  $J$  для  $S = 2$  и  $L = 2$ :

$$\Delta E(J = 4) = 4A, \quad (1.34)$$

$$\Delta E(J = 3) = 0, \quad (1.35)$$

$$\Delta E(J = 2) = -3A, \quad (1.36)$$

$$\Delta E(J = 1) = -5A, \quad (1.37)$$

$$\Delta E(J = 0) = -6A. \quad (1.38)$$

Структура энергетических уровней этой системы показана на рис. 1.2.

Отметим, что разность энергий между смежными компонентами дается выражением

$$\Delta E(J) - \Delta E(J - 1) = AJ. \quad (1.39)$$

Эта формула известна как правило интервалов Ланде.

(в) «Центр тяжести» терма не смещается под действием спин-орбитального взаимодействия. Об этом можно было бы догадаться, поскольку естественно ожидать, что среднее значение  $\vec{L} \cdot \vec{S}$  для всех возможных ориентаций  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  равно нулю.

К этому заключению можно придти иначе, используя формулы суммирования (1.25)–(1.27) для оценки величины смещения центра тяжести. Каждому  $J$

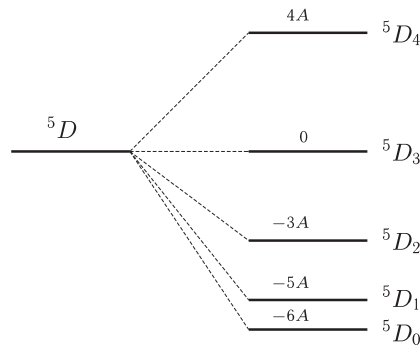


Рис. 1.2. Расщепление терма  ${}^5D$  за счет спин-орбитального взаимодействия при  $A > 0$

соответствуют  $2J + 1$  зеемановских подуровней, так что средний энергетический сдвиг  $\langle \Delta E \rangle$  дается суммой:

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{A}{2} \sum_{J=|L-S|}^{L+S} (2J+1)[J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)] = 0. \quad (1.40)$$

#### 1.4. Сверхтонкая структура и эффект Зеемана в атоме водорода

В этой классической задаче нас интересует то, что называется *сверхтонкой структурой*, возникающей, в общем случае, вследствие взаимодействия электронов атома с электрическими и магнитными мультипольными полями ядра (наиболее важными из них являются магнитное дипольное и электрическое квадрупольное). Переход между сверхтонкими уровнями основного состояния отвечает за знаменитую в радиоастрономии линию с длиной волны 21 см. Это расщепление было измерено с чрезвычайно высокой точностью с помощью водородного мазера. Переход между сверхтонкими уровнями основного состояния цезия используется для атомных часов, и частота этого перехода определяет секунду.

**(а)** Рассчитать расщепление (в МГц) сверхтонких уровней  $F = 1$  и  $F = 0$  основного состояния атома водорода ( ${}^2S_{1/2}$ ). Гамильтониан какого вида описывает сверхтонкое взаимодействие?

**(б)** Рассмотреть влияние однородного магнитного поля  $B$  на уровни основного состояния атома водорода (эффекты влияния внешних полей на атомы более детально рассмотрены в Главах 2 и 4). Взаимодействием протона с внешним магнитным полем пренебречь. Рассчитать зависимость энергий подуровней основного состояния от приложенного магнитного поля  $B$ .

**(в)** При учете взаимодействия магнитного момента протона с магнитным полем два энергетических уровня пересекаются при некотором значении поля. Определить какие уровни пересекаются и при каком значении поля?

#### Подсказка

Для ответа по пункту (а) следует учесть, что электрон не обладает орбитальным угловым моментом, и можно считать, что электрон создает магнитное поле  $\vec{B}_e$ ,



определяемое намагниченностью  $\vec{M}_e(\vec{r})$ :

$$\vec{M}_e(r) = -g_e \mu_0 \vec{S} |\psi_{100}(r)|^2, \quad (1.41)$$

где  $g_e = 2$  —  $g$ -фактор Ланде для электрона<sup>1)</sup> и  $\psi_{100}(\vec{r})$  — волновая функция основного состояния атома водорода ( $n = 1$ ,  $l = 0$  и  $m_l = 0$ ).

### Решение

**(а)** Волновая функция  $\psi_{100}(\vec{r})$  — сферически симметрична, так что можно ожидать, что средняя намагниченность (1.41), создаваемая электроном, включает в себя вклады концентричных сфер, каждая из которых обладает постоянной намагниченностью  $\vec{M}_i$ :

$$\sum_i \vec{M}_i = \vec{M}_e(r). \quad (1.42)$$

Вспоминая из курса электромагнетизма [Griffiths (1999)], что магнитное поле внутри шара с однородной намагниченностью  $\vec{M}$  дается выражением

$$\vec{B} = \frac{8\pi}{3} \vec{M}, \quad (1.43)$$

для поля при  $r = 0$ , имеем

$$\vec{B}(0) = \frac{8\pi}{3} \sum_i \vec{M}_i = \frac{8\pi}{3} \vec{M}_e(0). \quad (1.44)$$

Из этого выражения, используя (1.41), можно вычислить поле на протоне.

Мы полагаем, что  $|\psi_{100}(\vec{r})|^2 = |\psi_{100}(0)|^2$  по всему объему протона<sup>2)</sup>, так что

$$\vec{B}_e = -\frac{16\pi}{3} \mu_0 |\psi_{100}(0)|^2 \vec{S} = -\frac{16}{3a_0^3} \mu_0 \vec{S}. \quad (1.45)$$

Здесь мы воспользовались тем, что

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3}. \quad (1.46)$$

Следовательно, гамильтониан  $H_{\text{hf}}$ , описывающий взаимодействие магнитного момента  $\vec{\mu}_p$  протона с магнитным полем, имеет вид

$$H_{\text{hf}} = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_e = \frac{16}{3a_0^3} g_p \mu_N \mu_0 \vec{I} \cdot \vec{S}, \quad (1.47)$$

где  $g_p = 5,58$  —  $g$ -фактор протона, а  $\mu_N$  — ядерный магнетон.

С помощью того же приема, что мы использовали в задаче 1.3, находим вид гамильтониана:

$$H_{\text{hf}} = a \vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{a}{2} (F^2 - I^2 - S^2). \quad (1.48)$$

<sup>1)</sup> Магнетон Бора принято считать положительным, так что магнитный дипольный момент электрона  $\mu_e = -g_e \mu_0$ .

<sup>2)</sup> Существенно заметить, что сверхтонкое взаимодействие в этом случае возникает вследствие перекрытия волновых функций протона и электрона.

В системе единиц, в которой  $\hbar = 1$ ,

$$a \approx 5,58 \frac{16}{3a_0^3} \mu_N \mu_0 \approx 1420 \text{ МГц}, \quad (1.49)$$

и, в собственных значениях операторов угловых моментов, получаем

$$H_{\text{hf}} = \frac{a}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)]. \quad (1.50)$$

Следовательно, сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода

$$\Delta E_{\text{hf}} \approx 1420 \text{ МГц}, \quad (1.51)$$

что соответствует электромагнитному излучению с длиной волны  $\lambda = 21 \text{ см}$ .

**(6)** Из (1.50) видно, что собственные состояния энергии гамильтониана, описывающего сверхтонкое взаимодействие, являются также собственными состояниями операторов  $\{F^2, F_z, I^2, S^2\}$ . Поэтому, если записать матрицу этого гамильтониана в базисе связанных состояний, она окажется диагональной. Однако гамильтониан  $H_B$ , описывающий взаимодействие магнитного момента электрона с внешним магнитным полем,

$$H_B = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = 2\mu_0 B S_z \quad (1.52)$$

диагонален в базисе несвязанных состояний, составленном из собственных состояний операторов  $\{I^2, I_z, S^2, S_z\}$ . Соотношение между базисами связанных и несвязанных состояний имеет вид

$$|F=1, M_F=1\rangle = |+\rangle_S |+\rangle_I, \quad (1.53)$$

$$|F=1, M_F=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_S |-\rangle_I + |-\rangle_S |+\rangle_I), \quad (1.54)$$

$$|F=1, M_F=-1\rangle = |-\rangle_S |-\rangle_I, \quad (1.55)$$

$$|F=0, M_F=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_S |-\rangle_I - |-\rangle_S |+\rangle_I). \quad (1.56)$$

Матрица полного гамильтониана  $\mathbf{H}$ , т.е. в базисе связанных состояний, определяется с помощью уравнений (1.50) и (1.52):

	$ 1, 1\rangle$	$ 1, -1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 0, 0\rangle$
$\langle 1, 1 $	$\frac{a}{4} + \mu_0 B$	0	0	0
$\langle 1, -1 $	0	$\frac{a}{4} - \mu_0 B$	0	0
$\langle 1, 0 $	0	0	$\frac{a}{4}$	$\mu_0 B$
$\langle 0, 0 $	0	0	$\mu_0 B$	$-\frac{3a}{4}$

Эту матрицу можно использовать для определения энергий состояний в зависимости от поля  $B$  с помощью уравнения Шрёдингера

$$\mathbf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.57)$$

которое подразумевает, что

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{1})|\psi\rangle = 0, \quad (1.58)$$

где  $\mathbf{1}$  обозначает единичную матрицу. Если матрица  $(\mathbf{H} - E\mathbf{1})$  имеет обратную, то умножая обе части (1.58) на  $(\mathbf{H} - E\mathbf{1})^{-1}$ , мы видим, что  $|\psi\rangle = 0$ . Если же  $|\psi\rangle \neq 0$ , то чтобы удовлетворить уравнению (1.58), матрица  $(\mathbf{H} - E\mathbf{1})$  должна быть сингулярной. Иначе говоря, ее определитель должен быть равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \frac{a}{4} + \mu_0 B - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a}{4} - \mu_0 B - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a}{4} - E & \mu_0 B \\ 0 & 0 & \mu_0 B & -\frac{3a}{4} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (1.59)$$

Приведенное выражение известно как *секулярное уравнение*. Матрица является блочно-диагональной, и энергии определяются из уравнений

$$\frac{a}{4} + \mu_0 B - E = 0, \quad (1.60)$$

$$\frac{a}{4} - \mu_0 B - E = 0, \quad (1.61)$$

$$\left(\frac{a}{4} - E\right)\left(-\frac{3a}{4} - E\right) - \mu_0^2 B^2 = 0. \quad (1.62)$$

Это приводит к следующим значениям энергий:

$$E_1 = \frac{a}{4} + \mu_0 B, \quad (1.63)$$

$$E_2 = \frac{a}{4} - \mu_0 B, \quad (1.64)$$

$$E_3 = -\frac{a}{4} + \frac{a}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{\mu_0^2 B^2}{a^2}}, \quad (1.65)$$

$$E_4 = -\frac{a}{4} - \frac{a}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{\mu_0^2 B^2}{a^2}}, \quad (1.66)$$

изображенных в зависимости от поля  $B$  на рис. 1.3.

**(в)** Если мы учтем влияние магнитного момента протона, мы получаем

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_e + \vec{\mu}_p, \quad (1.67)$$

так что

$$H_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g_e \mu_0 B S_z - g_p \mu_N B I_z. \quad (1.68)$$

В пределе сильных полей состоянием с наибольшей энергией должно быть состояние  $|+\rangle_S |-\rangle_I$ . Более того, в малых полях наибольшую энергию имеет состояние  $|1, 1\rangle = |+\rangle_S |+\rangle_I$ . Следовательно, эти два уровня в некотором поле должны пересечься.

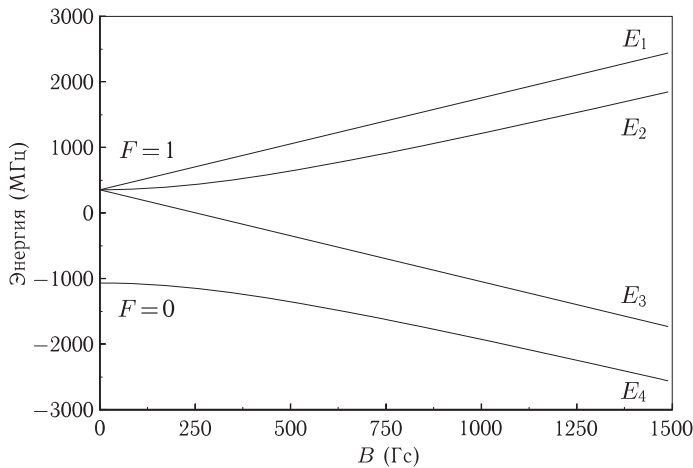


Рис. 1.3. Зависимость энергий сверхтонкого мультиплета основного состояния атома водорода от магнитного поля. Эта зависимость известна как диаграмма Брейта–Раби. В малых полях система хорошо описывается в базисе связанных состояний ( $F = 1, 0$ ), тогда как в сильных полях энергетические состояния хорошо описываются в базисе несвязанных состояний. Энергии состояний  $|F = 1, M_F = 1\rangle$  и  $|F = 1, M_F = -1\rangle$  линейно зависят от магнитного поля, поскольку они не перемешиваются магнитным полем с другими состояниями (см. выражения (1.53) и (1.55))

В пункте (б), где мы пренебрегали магнитным моментом протона, в достаточно сильных полях ( $2\mu_0 B/a \gg 1$ ) энергетическое расстояние между двумя верхними уровнями (см. выражения (1.63) и (1.65)) имеет вид

$$E_1 - E_3 \approx \frac{a}{2}. \quad (1.69)$$

Когда энергетическое расстояние между состояниями  $|+\rangle_I$  и  $|-\rangle_I$  из-за взаимодействия протона с магнитным полем становится равным этой энергии, уровни пересекаются. Это происходит в магнитном поле

$$B \approx \frac{a}{2 \times 5,58 \times \mu_N} \approx 167 \text{ кГс}. \quad (1.70)$$

## 1.5. Водородоподобные ионы

Атом водорода — особо привлекательный объект для изучения атомной энергетической структуры, поскольку его простота допускает точные теоретические расчеты, результаты которых могут быть сопоставлены с экспериментальными данными. Ряд особенностей энергетической структуры атома водорода еще более выразительно проявляется в водородоподобных ионах — атомах, содержащих единственный электрон, связанный с ядром, с зарядом  $Z > 1$ . Водородоподобные ионы представляют интерес, например, для прецизионных экспериментов по проверке квантовой электродинамики [Silver (2001)], по измерению массы электрона [Quint (2001)], по измерению константы тонкой структуры [Quint (2001)], и по проверке стандартной модели электрослабых взаимодействий [Zolotorev и Budker (1997)], и др.

Для водородоподобных ионов с ядерным зарядом  $Z$  найти масштабное преобразование по  $Z$  для:

(а) математического ожидания  $r$ ,  $1/r$ ,  $1/r^3$ , где  $r$  — расстояние между ядром и электроном,

(б) математического ожидания потенциальной энергии  $V$ ,

(в) полной энергии  $E$ ,

(г) вероятности найти электрон в начале координат  $|\psi(r=0)|^2$ ,

(д)  $\left|\frac{\partial}{\partial r}\psi(r=0)\right|^2$ ,

(е) энергии тонкого расщепления (см. задачу 1.3), и

(ж) энергии сверхтонкого расщепления, связанного с магнитным дипольным моментом ядра (см. задачу 2.4). В этом пункте пренебречь несистематичностью связи ядерного дипольного момента с  $Z$ .

### Подсказки

Не следует использовать явный вид волновых функций. Достаточно рассмотреть размерности интересующих нас величин.

### Решение

Прежде всего, посмотрим, как естественная единица длины атома водорода (боровский радиус  $a_0 = \hbar^2/me^2$ ) соотносится с естественной единицей длины водородоподобного иона. Гамильтониан водородоподобного иона имеет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}. \quad (1.71)$$

Заменяя в гамильтониане (1.71)  $r$  на  $\rho = r/Z$  и, принимая во внимание

$$\nabla^2 \rightarrow Z^2 \nabla_\rho^2, \quad (1.72)$$

имеем

$$H = Z^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\rho^2 - \frac{e^2}{\rho} \right). \quad (1.73)$$

Таким образом, гамильтониан водородоподобного иона может быть приведен в однозначное соответствие с гамильтонианом атома водорода путем масштабирования  $r$  с фактором  $1/Z$ , так что естественный масштаб длины для водородоподобного иона имеет вид:

$$a = \frac{a_0}{Z}. \quad (1.74)$$

Из (1.73) также видно, что полная энергия масштабируется по отношению к атому водорода как  $Z^2$ , что отвечает на пункт (в).

(а) Как показано выше,  $a = a_0/Z$  представляет собой единственный масштабный фактор для системы. Поэтому любая величина, содержащая единицы (длина) <sup>$n$</sup>  должна масштабироваться фактором  $Z^{-n}$ . Так, для любого  $n$  справедливо

$$\langle r^n \rangle \propto Z^{-n}. \quad (1.75)$$

**(б)** Потенциальная энергия электрона водородоподобного иона имеет вид

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (1.76)$$

и, на основе пункта (а), поскольку  $r^{-1} \propto Z$ , ясно, что

$$\boxed{\langle V \rangle \propto Z^2}. \quad (1.77)$$

**(в)** Хотя мы уже видели из уравнения (1.73), что  $\langle E \rangle \propto Z^2$ , этот результат может быть также получен из сопоставления потенциальной энергии с полной. В соответствии с теоремой вириала, для двух частиц, взаимодействие которых описывается центральным консервативным потенциалом  $V(r) = Cr^n$ , математическое ожидание кинетической энергии  $\langle T \rangle$  дается выражением

$$\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle. \quad (1.78)$$

Для электростатического притяжения между ядром и электроном  $n = -1$ . Поэтому

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2} \langle V \rangle. \quad (1.79)$$

Таким образом, находим:

$$\boxed{\langle E \rangle \propto Z^2}. \quad (1.80)$$

**(г)** Поскольку водородоподобные волновые функции нормированы:

$$\int_0^\infty |\psi(r)|^2 d^3r = 1, \quad (1.81)$$

и очевидно, что  $|\psi(r=0)|^2$  имеет размерность (длина) $^{-3}$ , то

$$\boxed{|\psi(r=0)|^2 \propto Z^3}. \quad (1.82)$$

**(д)**  $\left| \frac{\partial}{\partial r} \psi(r=0) \right|^2$  имеет размерность (длина) $^{-5}$ , поэтому очевидно, что

$$\boxed{\left| \frac{\partial}{\partial r} \psi(r=0) \right|^2 \propto Z^5}. \quad (1.83)$$

**(е)** В системе координат электрона ядро с зарядом  $Z$  обращается вокруг него со скоростью  $v \approx Z\alpha c$  (см. Приложение А). Поскольку создаваемое ядром электрическое поле  $\mathcal{E}$  имеет вид

$$\mathcal{E} = \frac{Ze}{r^2}, \quad (1.84)$$

магнитное поле  $B$ , возникающее в результате взаимного движения ядра и электрона, дается выражением

$$B = \left| \frac{\vec{v} \times \vec{\mathcal{E}}}{c} \right| \approx \frac{Z^2 \alpha e}{r^2}. \quad (1.85)$$

Это магнитное поле взаимодействует со спиновым дипольным магнитным моментом электрона, вызывая сдвиг энергии

$$\Delta E_f \approx \mu_0 B \propto \frac{Z^2}{r^2}. \quad (1.86)$$

Поскольку среднее значение величины  $r^{-2}$  масштабируется фактором  $Z^2$ , масштабный фактор тонкого расщепления имеет вид

$$\boxed{\Delta E_f \propto Z^4}. \quad (1.87)$$

**(ж)** В пункте (а) задачи 1.4 было показано, что энергия сверхтонкого расщепления  $\Delta E_{hf}$  для  $s$  состояния пропорциональна  $|\psi(0)|^2$ , потому что сверхтонкий сдвиг вызван взаимодействием дипольного момента ядра с магнитным полем, создаваемым магнитным дипольным моментом, связанным с электронным спином. Используя результат пункта (г), мы видим, что

$$\boxed{\Delta E_{hf} \propto Z^3}. \quad (1.88)$$

Тот же результат справедлив для состояний с большими значениями углового момента. Разумеется, сверхтонкий сдвиг может рассматриваться как результат взаимодействия электронного магнитного дипольного момента с магнитным полем, создаваемым ядерным дипольным моментом (задача может быть решена с любой точки зрения).

Поскольку магнитное поле диполя спадает по закону  $r^3$ , то, согласно пункту (а) данной задачи,  $\Delta E_{hf} \propto \langle r^{-3} \rangle \propto Z^3$ .

Заметим, что вклад ядерного квадрупольного момента  $Q_{ij}$  в величину сверхтонкого расщепления, являющийся результатом взаимодействия момента  $Q$  с электрическим полем электрона  $E = e/r^2$ , масштабируется аналогичным образом:

$$\Delta E_{hf}^{(Q)} = Q_{ij} \cdot \frac{\partial E_i}{\partial x_j} \sim Q \frac{\partial E}{\partial r} \sim \frac{Qe}{r^3} \propto Z^3. \quad (1.89)$$

## 1.6. Геоний

Замечательная и полезная рукотворная «атомная система» была изобретена Гансом Демельтом с сотрудниками [Dehmelt (1989)]. Система состоит из одного электрона (или позитрона), заключенного в ловушке Пеннинга (рис. 1.4). Демельт назвал эту систему «геонием» [Van Dyck, Jr. и др. (1976)], рассматривая ее как электрон, связанный с земной опорой<sup>1)</sup>. Атом геония сделал возможным провести точные измерения  $g$ -факторов электрона и позитрона [Van Dyck, Jr. и др. (1987)], которые в совокупности с результатами расчетов [Kinoshita (1996)] представляют один из наилучших тестов квантовой электродинамики и один из наиболее точных методов определения постоянной тонкой структуры. Эти результаты недавно были улучшены еще почти на порядок величины группой Габриелз [Odom и др. (2006), Gabrielse

<sup>1)</sup> Примечание редактора: за многолетний цикл работ по исследованию одиночных электронов и ионов в электромагнитных ловушках профессор Вашингтонского университета Ганс Демельт был в 1989 г. удостоен Нобелевской премии (вместе с профессором Боннского университета Вольфгангом Паулем).

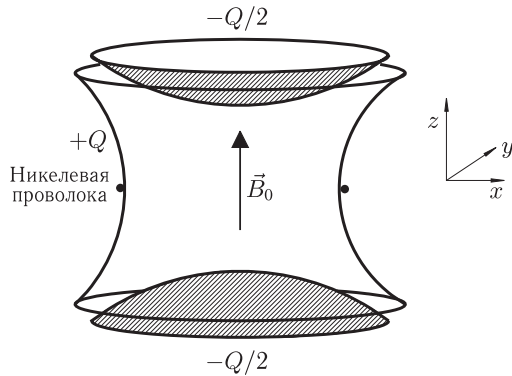


Рис. 1.4. Схематическое изображение ловушки Пеннинга. Верхние и нижние проводящие чашки заряжены зарядом  $-Q/2$ , а боковые стенки — зарядом  $+Q$ , создающим квадрупольное электрическое поле. Вдоль оси  $\hat{z}$  приложено сильное однородное магнитное поле  $\vec{B}_0$ . Вокруг центра кольцевого электрода намотана намагниченная до насыщения полем  $\vec{B}_0$  никелевая проволока, создающая «бутылочное» (запирающее) поле, которое используется для измерения параметров захваченного ловушкой электрона

и др. (2007)] в завершение почти 20-летних усилий по разработке новой техники после измерений 1987 года.

Квадрупольное электростатическое поле, создаваемое электродами ловушки Пеннинга, описывается скалярным потенциалом

$$\Phi = N(x^2 + y^2 - 2z^2). \quad (1.90)$$

Кроме электростатического поля, в ловушке присутствует и однородное магнитное поле  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ . Эти поля позволяют удерживать электрон вблизи оси ловушки в течение многих месяцев! Движение электрона можно разделить на аксиальные осцилляции (электрон движется вдоль оси симметрии ловушки  $z$ , инвертируя направление своего движения каждый раз, когда он подходит слишком близко к одной из отрицательно заряженных чашек) и движение в плоскости  $xy$  (циклотронное движение и медленный дрейф, называемый магнетронным движением).

**(а)** Какова частота аксиальных осцилляций  $\omega_z$  для движения вдоль оси  $z$  (предполагая, что электрон находится на оси  $x = y = 0$ )?

**(б)** Пренебрегая влиянием квадрупольного электрического поля, рассчитать частоту циклотронного движения  $\omega_c$  электрона вокруг оси ловушки.

**(в)** Гамильтониан циклотронного движения может быть поставлен в однозначное соответствие с гамильтонианом одномерного простого гармонического осциллятора (1ДПГО). Показать, как это делается (впервые это сделал Ландау в 1930 году, и соответствующие уровни энергии известны как уровни Ландау)). По-прежнему пренебрегаем электрическим квадрупольным полем.

**(г)** Рассмотреть электрон в средней плоскости ловушки ( $z = 0$ ). Учитывая одновременно однородное магнитное поле  $B_0$  вдоль оси  $z$  и электрическую силу, рассчитать частоты кругового движения.

Более высокая частота — это смещенная циклотронная частота  $\omega'_c$ , а низкая частота  $\omega_m$  описывает *магнетронное движение* (рис. 1.5). Магнетронное движение —



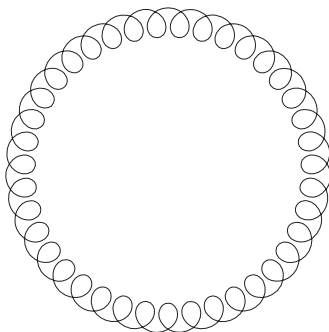


Рис. 1.5. Траектория электрона в средней плоскости ловушки Пеннинга при его магнетронном и циклотронном движении. Траектория является суперпозицией компактных орбит, связанных с циклотронным движением, и орбиты большего размера, связанной с магнетронным движением. В целях наглядности отношение периода циклотронного движения к периоду магнетронного движения увеличено в  $10^5$  раз

это частный случай того, что известно как  $\vec{E} \times \vec{B}$  дрейф (см., например, Jackson 1985), где заряженная частица в неколлинеарных магнитном и электрическом полях дрейфует в направлении, ортогональном обоим полям. Поскольку в данном случае магнитное поле направлено по оси  $z$ , а электрическое поле — радиально, электрон движется по круговой траектории <sup>1)</sup>, централизованной на оси ловушки.

Оказывается, что магнетронное движение может быть описано, используя формализм IDПГО, точно так же как и циклотронное движение, с той оговоркой, что с ростом магнетронного квантового числа  $q$  магнетронная энергия уменьшается [Grown и Gabrielse (1986)]. Это следует из того обстоятельства, что электростатический потенциал электрона в средней плоскости ловушки имеет вид  $\Phi = \aleph(x^2 + y^2)$ , что означает, что большему радиусу магнетронной орбиты соответствует меньшая энергия. Следовательно, магнетронное движение является несвязанным в том смысле, что по мере диссипации энергии электрона,  $q$  становится все больше до тех пор, пока частицы не сталкиваются с кольцевым электродом.

(д) В ловушке Пеннинга, использованной Демельтом в Вашингтонском университете, частота аксиальных осцилляций составляла  $\omega_z = 2\pi \times 60$  МГц. Величина аксиального магнитного поля составляла 5 Т (50 000 Гс).

Нарисовать схему энергетических уровней геония при заданных экспериментальных параметрах. Чему равна разность энергий между состояниями геония  $|m = +1/2, n, k, q\rangle$  и  $|m = -1/2, n + 1, k, q\rangle$ , где  $m$  — квантовое число, описывающее проекцию спина электрона на ось  $z$ , а  $n$  и  $q$  — циклотронное и магнетронное квантовые числа и  $k$  — квантовое число, описывающее аксиальные колебания?

(е) Кроме полей, уже описанных во введении к задаче, к электрону прикладывается слабое запирающее магнитное поле  $\vec{B}_b$

$$\vec{B}_b = -\beta \left[ zx\hat{x} + zy\hat{y} - \left( z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \hat{z} \right]. \quad (1.91)$$

<sup>1)</sup> Здесь мы разложили движение в плоскости  $xy$  на циклотронную и магнетронную составляющие, каждая из которых является круговой.

Запирающее поле позволяет измерять циклотронное спиновое и магнетронное квантовые числа с помощью метода, названного Демельтом (1989) «континуальным эффектом Штерна–Герлаха». Неоднородное запирающее поле взаимодействует со спином электрона и его орбитальным движением (поскольку круговое циклотронное и магнетронное движение заряженной частицы создает магнитные дипольные моменты, взаимодействующие с запирающим полем). Эти взаимодействия смещают частоту аксиальных осцилляций, которая измеряется с помощью резонансного радиочастотного контура.

Показать, что поправка к частоте аксиальных осцилляций  $\omega_z$ , обусловленная различной ориентацией спина и циклотронно-магнетронного движения, имеет вид

$$\delta\omega_z \approx \left(m + n + \frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{\omega_c} q\right) \frac{2\mu_0\beta}{m_e\omega_z}. \quad (1.92)$$

### Подсказки

В п. (в) можно использовать то обстоятельство, что импульс  $m\vec{v}$  электрона в присутствии магнитного векторного потенциала  $\vec{A}$  связан с каноническим импульсом  $\vec{p}$  следующим образом (см., например, [Griffiths (1999)] или [Landau и Lifshitz (1987)]):

$$m_e\vec{v} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}, \quad (1.93)$$

и это — тот самый импульс, который входит в член гамильтониана, отвечающий кинетической энергии. Например, выберите векторный потенциал в виде

$$\vec{A} = -B_0 y \hat{x} \quad (1.94)$$

и покажите, что эффективный гамильтониан  $H'_c$ , описывающий движение в плоскости  $xy$ , может быть записан как

$$H'_c = \frac{1}{2m_e} p_y^2 + \frac{1}{2} m_e \omega_c^2 (y - y_0)^2, \quad (1.95)$$

где  $y_0$  — постоянная.

В п. (е) электрону можно приписать эффективный дипольный момент  $\mu$ , связанный с магнетронным и циклотронным движением, путем введения уровней энергии Ландау, расстояние между которыми равно  $\mu B_0$ .

### Решение

(а) На оси ловушки Пеннинга ( $x = y = 0$ ) возвращающая сила имеет вид

$$F_z = e \frac{\partial \Phi}{\partial z} = -4e\aleph z. \quad (1.96)$$

Эффективная константа упругости для этого простого гармонического движения равна  $4e\aleph$ , так что частота аксиальных колебаний дается выражением

$$\boxed{\omega_z = \sqrt{\frac{4e\aleph}{m_e}}}. \quad (1.97)$$

**(б)** Для того чтобы электрон удерживался на орбите, сила, действующая на него со стороны магнитного поля  $B_0$ , должна уравновешиваться центробежной силой:

$$m_e \omega_c^2 r = e \frac{v}{c} B_0 = e \frac{\omega_c r}{c} B_0, \quad (1.98)$$

где  $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$  — радиус электронной орбиты, а  $v$  — скорость электрона. Циклотронная частота имеет вид

$$\omega_c = \frac{eB_0}{m_e c}. \quad (1.99)$$

**(в)** Вектор-потенциал  $\vec{A}$  однородного поля в направлении  $\hat{z}$  может быть записан, например, как

$$\vec{A} = -B_0 y \hat{x}. \quad (1.100)$$

С учетом выражения (1.93) гамильтониан  $H_c$ , описывающий циклотронное движение, имеет вид

$$H_c = \frac{1}{2m_e} \left[ \left( p_x - \frac{e}{c} B_0 y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right]. \quad (1.101)$$

Заметим, что этот гамильтониан не содержит координат  $x$  и  $z$ , а потому коммутирует с импульсами в направлениях  $x$  и  $z$ :

$$[H_c, p_x] = [H_c, p_z] = 0. \quad (1.102)$$

Следовательно, в этом случае циклотронное и аксиальное движения могут рассматриваться независимо, и  $p_x$  может считаться постоянной. Перепишем эффективный гамильтониан  $H'_c$ , описывающий движение в плоскости  $xy$ , в виде

$$H'_c = \frac{1}{2m_e} p_y^2 + \frac{1}{2} m_e \omega_c^2 (y - y_0)^2, \quad (1.103)$$

где  $y_0 = c p_x / (e B_0)$ .

Таким образом, циклотронное движение может рассматриваться в рамках формализма одномерного простого гармонического осциллятора, несмотря на двумерную природу движения в этой задаче.

**(г)** В средней плоскости ловушки сила  $\vec{F}_e$ , действующая на электрон со стороны квадрупольного поля, радиальна:

$$\vec{F}_e = e \frac{\partial \Phi}{\partial r} \hat{r} = 2e \mathcal{N} r \hat{r} = \frac{m_e}{2} \omega_z^2 r \hat{r}, \quad (1.104)$$

где мы воспользовались выражением (1.97). Эта сила вычитается из радиальной силы, вызванной магнитным полем (формула (1.98):

$$m_e \omega_c^2 r = e \frac{\omega_r}{c} B_0 - \frac{m_e}{2} \omega_z^2 r. \quad (1.105)$$

Из этого соотношения (используя формулу (1.99)) получаем квадратное уравнение для новых частот  $\omega$  кругового движения электрона в средней плоскости:

$$\omega^2 - \omega_c \omega + \frac{\omega_z^2}{2} = 0. \quad (1.106)$$

Два корня этого уравнения дают сдвинутую циклотронную частоту  $\omega'_c$  и магнетронную частоту  $\omega_m$ :

$$\omega'_c \approx \omega_c - \frac{\omega_z^2}{2\omega_c} \quad (1.107)$$

и

$$\omega_m \approx \frac{\omega_z^2}{2\omega_c}. \quad (1.108)$$

Эти приближенные частоты верны в предположении, что  $\omega_c \gg \omega_z$ , что и выполняется в эксперименте.

(д) Из пп. (а) и (в) и из утверждения п. (г) мы знаем, что аксиальное циклотронное и магнетронное движения могут быть описаны в рамках формализма 1D ПГО. Вспомним также, что во внешнем магнитном поле  $B_0$  электронные состояния со спином вверх и вниз различаются по энергии. Следовательно, энергетические уровни геония характеризуются 4 квантовыми числами:  $m$ , обозначающее проекцию спина на ось  $z$ ;  $n$ , описывающее циклотронное движение;  $k$  — аксиальное квантовое число и  $q$  — магнетронное квантовое число. Спиновое квантовое число принимает значения  $\pm 1/2$ , а числа  $n$ ,  $k$  и  $q$  — значения  $0, 1, 2, 3, \dots$

Энергия индивидуального состояния геония  $|n, m, k, q\rangle$  дается соотношением

$$E_{nmkq} = g_e \mu_0 B_0 m + \hbar \omega'_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar \omega_z \left(k + \frac{1}{2}\right) - \hbar \omega_m \left(q + \frac{1}{2}\right), \quad (1.109)$$

где  $g_e$  —  $g$ -фактор электрона. Значения энергетических расщеплений для условий эксперимента, описанных при постановке задачи, таковы:

$$g_e \mu_0 B_0 \approx 2 \times 1,4 \text{ МГц/Гс} \times 50\,000 \text{ Гс} = 140 \text{ ГГц}, \quad (1.110)$$

$$\frac{\omega'_c}{2\pi} \approx \frac{eB_0}{2\pi m_e c} \approx \frac{4,8 \cdot 10^{-10} \text{ СГС} \times 50\,000 \text{ Гс}}{2\pi \times 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г} \times 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}} = 140 \text{ ГГц}, \quad (1.111)$$

$$\frac{\omega_z}{2\pi} = 60 \text{ МГц}, \quad (1.112)$$

$$\frac{\omega_m}{2\pi} = \frac{\omega_z^2}{4\pi\omega_c} \approx \frac{(60 \text{ МГц})^2}{2 \times 140 \text{ ГГц}} \approx 13 \text{ кГц}, \quad (1.113)$$

где мы воспользовались тем фактом, что  $\omega'_c \approx \omega_c$ .

Это дает нам представление об энергетических уровнях геония. Разумеется, не случайно частоты (1.110) и (1.111) оказываются примерно равными. Посмотрим внимательнее на почти совпадающие расщепления спиновых и циклотронных состояний. Поскольку

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}, \quad (1.114)$$

энергетическое расстояние между состояниями  $|m = +1/2, n, k, q\rangle$  и  $|m = -1/2, n + 1, k, q\rangle$  геония имеет вид:

$$\Delta E \approx (g_e - 2)\mu_0 B_0 \approx 164 \text{ МГц}. \quad (1.115)$$

Таким образом, измерение этого расстояния позволяет определить величину  $g_e - 2$ . Электронный  $g$ -фактор отличается от 2 на малую величину  $\approx \alpha/(2\pi)$ , которая может быть точно рассчитана на основе квантовой электродинамики.

Схема энергетических уровней геония представлена на рис. 1.6.

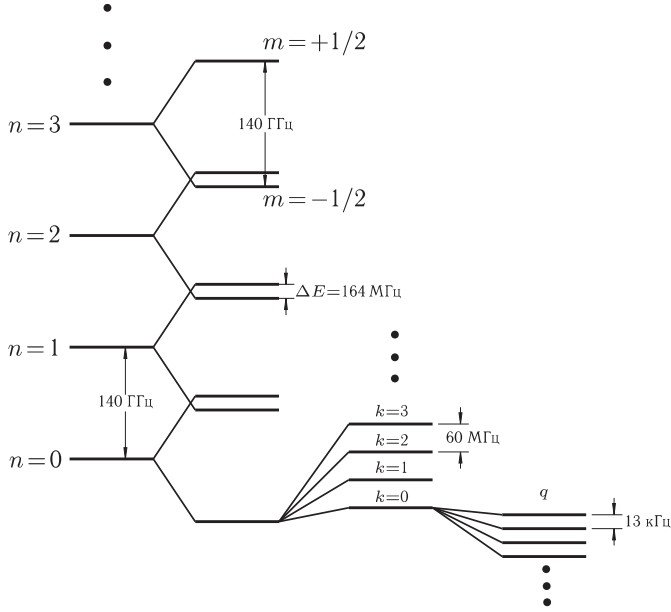


Рис. 1.6. Схема уровней геония (не в масштабе), заимствована из Van Dyck, Jr. и др. (1978)

(е) Здесь мы опять обратимся к частоте аксиальных колебаний электрона на оси ловушки ( $x = y = 0$ ), принимая теперь во внимание запирающее поле в связи со всеми остальными движениями.

Гамильтониан  $H$ , управляющий аксиальным движением, дается формулой:

$$H = \frac{p_z^2}{2m_e} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}_b - e\Phi = \frac{p_z^2}{2m_e} - \mu_{\text{eff}}\beta z^2 + 2e\aleph z^2, \quad (1.116)$$

где  $\mu_{\text{eff}}$  — эффективный магнитный момент электрона, обусловленный его спиновым, циклотронным и магнетронным движениями (см. ниже). Уравнение (1.116) соответствует гамильтониану 1D ПГО:

$$H = \frac{p_z^2}{2m_e} + \frac{1}{2} m_e \omega_z'^2 z^2, \quad (1.117)$$

где новая частота аксиальных колебаний  $\omega_z'$  дается выражением

$$\omega_z'^2 = -\frac{2\mu_{\text{eff}}\beta}{m_e} + \frac{4e\aleph}{m_e}. \quad (1.118)$$

Второй член в (1.118) — квадрат невозмущенной частоты аксиальных колебаний  $\omega_z$  (1.97), так что частота аксиальных колебаний в присутствии запирающего поля имеет вид:

$$\omega'_z = \left( -\frac{2\mu_{\text{eff}}\beta}{m_e} + \omega_z^2 \right)^{1/2} \approx \omega_z - \frac{\mu_{\text{eff}}\beta}{m_e\omega_z}. \quad (1.119)$$

Таким образом, поправка к частоте аксиальных колебаний дается выражением

$$\delta\omega_z \approx -\frac{\mu_{\text{eff}}\beta}{m_e\omega_z}. \quad (1.120)$$

Определим теперь величину  $\mu_{\text{eff}}$ , которая дается суммой

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_s + \mu_c + \mu_m, \quad (1.121)$$

где  $\mu_s$  — спиновой магнитный момент,  $\mu_c$  — циклотронный магнитный момент и  $\mu_m$  — магнитный момент, порожденный магнетронным движением. Для спинового магнитного момента имеем

$$\mu_s = -g_e\mu_0 m \approx -2\mu_0 m. \quad (1.122)$$

Если мы сопоставим  $-\mu_c B_0$  энергетическому расстоянию между смежными уровнями Ландау в циклотронном движении, мы можем связать циклотронную частоту с магнитным моментом:

$$\hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{e\hbar}{m_e c} \left( n + \frac{1}{2} \right) B_0 = -\mu_c B_0, \quad (1.123)$$

так что

$$\mu_c = -2\mu_0 \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.124)$$

Таким же способом можно описать магнетронное движение:

$$\mu_m = -2\mu_0 \left( \frac{\omega_m}{\omega_c} \right) \left( q + \frac{1}{2} \right). \quad (1.125)$$

Подставляя приведенные соотношения в (1.120), находим

$$\delta\omega_z \approx \frac{2\mu_0\beta}{\omega_z m_e} \left( m + n + \frac{1}{2} + (q + 1/2) \frac{\omega_m}{\omega_c} \right), \quad (1.126)$$

что согласуется с выражением, приведенным в постановке задачи, если пренебречь слагаемым  $1/2$ , связанным с магнетронным движением, поскольку для типичных условий эксперимента  $q \gg 1$ .

Таким образом, частота аксиальных осцилляций чувствительна к спиновым, циклотронным и магнетронным квантовым числам. Квантовый скачок электрона между энергетическими уровнями сопровождается сдвигом частоты  $\omega_z$ . На практике для измерения частоты  $\omega_z$  к чашкам электродов (рис. 1.4) прикладывается переменное индуцирующее напряжение, и амплитуда аксиальных колебаний резко возрастает, когда эта частота совпадает с резонансом. Этот метод регистрации использует «континуальный эффект Штерна–Герлаха», названный так по аналогии с классическим экспериментом (см., например, [Griffiths (1995)] или [Bransden и Joachain (2003)]), в котором траектории атомов серебра в атомном пучке возмущаются взаимодействием их дипольных моментов с градиентом магнитного поля.

Для измерения аномалии  $g_e - 2$  (рассмотренной в п. (д)) был использован остроумный прием. К электрону прикладывалось неоднородное магнитное поле на частоте  $\omega_{\text{rf}} \approx 2\pi \times 164$  МГц. Если бы неоднородное поле было постоянным, то электрон, движущийся в этом поле, «видел» бы магнитное поле, осциллирующее на циклотронной частоте. Поскольку же приложенное поле само осциллирует на частоте  $\omega_{\text{rf}}$ , то электрон видит (в своей системе координат) переменное поле на боковых частотах  $\omega = \omega_c \pm \omega_{\text{rf}}$ . Когда  $\omega_{\text{rf}}$  соответствует разности энергий  $\Delta E$  (из уравнения (1.115)) между спиновым расщеплением и циклотронной энергией, это поле индуцирует перевороты спина, так как  $\omega = \omega_c \pm \omega_{\text{rf}} = g_e \mu_0 B_0$ . Возросшая скорость спиновых переходов регистрируется с помощью «континуального эффекта Штерна–Герлаха». Так осуществляется прямое измерение аномалии  $g_e - 2$ .

### 1.7. Модель Томаса–Ферми (У)

Исходной точкой для точных численных расчетов структуры энергетических уровней сложных многоэлектронных атомов служит теория, развитая независимо Томасом и Ферми (см., например [Bransden и Joachain (2003)] или [Landau и Lifshitz (1977)]). Модель Томаса–Ферми предполагает, что электронное облако представляет собой ферми-газ при нулевой температуре. Центральный результат этой модели может быть получен путем приравнивания электростатических сил градиенту давления  $P(r)$ , возникающего вследствие действия запрета Паули:

$$\vec{\nabla}P(r) = \rho(r)\vec{E}(r) = -en(r)[- \vec{\nabla}\phi(r)], \quad (1.127)$$

где  $\rho(r) = -en(r)$  — плотность заряда,  $n(r)$  — плотность числа электронов,  $\vec{E}(r) = -\vec{\nabla}\phi(r)$  — напряженность электрического поля и  $\phi(r)$  — электростатический потенциал. Уравнение (1.127) отражает условие гидростатического равновесия. Это означает, что модель Томаса–Ферми трактует электронное облако как газ, во многом подобный атмосфере Земли с тем отличием, что здесь электронное облако удерживается около ядра электростатическим притяжением, а не гравитационной силой. При таком описании электронного облака электроны рассматриваются полуклассически и считаются допустимыми статистические аргументы. Такой подход оправдан, если число электронов в атоме достаточно велико ( $N \gg 1$ ).

**(а)** Объяснить, почему условие  $N \gg 1$  позволяет применять полуклассическое приближение.

#### Решение

Если  $N \gg 1$ , то, в соответствии с принципом Паули, многие электроны должны занимать состояния с большими радиальными квантовыми числами  $n$ . Основным условием применения полуклассического приближения служит требование, чтобы волновая функция испытывала много осцилляций в области пространства, где потенциал обнаруживает заметные изменения. Иными словами, длина волны де Бройля  $\lambda_{\text{dB}} \sim \hbar/p$  должна медленно меняться с расстоянием до ядра:

$$\frac{\partial \lambda_{\text{dB}}}{\partial r} \ll 1. \quad (1.128)$$

Типичная величина углового момента электрона с радиальным квантовым числом  $n$  задается соотношением

$$L = rp \sim n\hbar, \quad (1.129)$$

которое предполагает, что  $\lambda_{\text{дВ}} \sim r/n$ . Поэтому условие (1.128) эквивалентно требованию

$$n \gg 1, \quad (1.130)$$

что справедливо для большинства электронов, если  $N \gg 1$ .

**(б)** Рассчитать импульс Ферми  $p_F$  (импульс электрона с наибольшей энергией) для электронного газа в малом объеме  $V$ . Воспользоваться тем фактом, что поскольку электронные волновые функции полуклассичны, они могут быть аппроксимированы плоскими волнами. Принять во внимание также, что число электронов в объеме  $V$  достаточно велико, чтобы использовать статистический подход.

### Решение

Число электронных состояний с импульсом, лежащим в интервале между  $p$  и  $p + dp$ , и занимающих объем  $V$ , дается выражением

$$dN = \frac{1}{\pi^2} \frac{p^2 dp}{\hbar^3} V. \quad (1.131)$$

Здесь мы учли, что число возможных состояний на единицу объема для электрона удваивается из-за наличия спина (по сравнению с частицей, у которой спина нет). Число доступных электронных состояний на единицу объема (при нулевой температуре эта величина равна плотности электронов, поскольку все состояния заселены) может быть найдено путем интегрирования выражения (1.131) в интервале импульсов от 0 до импульса Ферми  $p_F$ , что дает

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3}{\hbar^3}. \quad (1.132)$$

Из соотношения (1.132) получаем

$$p_F = \hbar \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}. \quad (1.133)$$

**(в)** Рассчитать полную кинетическую энергию  $K$  электронного газа.

### Решение

Полную кинетическую энергию можно получить путем умножения  $dN$  из формулы (1.131) на кинетическую энергию одного электрона  $p^2/2m$  (где  $m$  — масса электрона) и интегрируя в интервале от 0 до  $p_F$ :

$$K = \frac{p_F^5 V}{10\pi^2 m \hbar^3}. \quad (1.134)$$



Подставляя значение  $p_F$  из формулы (1.133) в наше выражение для кинетической энергии (1.134), получаем

$$K = \frac{\hbar^2}{10\pi^2 m} \frac{(3\pi^2 N)^{5/3}}{V^{2/3}}. \quad (1.135)$$

(г) Используя термодинамическое выражение для давления Ферми  $P = -dK/dV$ , справедливое при нулевой температуре (см. [Reif (1965)]), рассчитать давление электронного газа как функцию плотности. Модель Томаса–Ферми предполагает, что объем  $V$  мал по сравнению с объемом атома, так что  $P$  — это локальное давление на заданном расстоянии от ядра.

### Решение

Используя термодинамическое соотношение  $P = -dK/dV$ , имеем

$$P = \frac{\hbar^2}{15\pi^2 m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{5/3}, \quad (1.136)$$

что дает давление в зависимости от электронной плотности  $n(r)$  в атоме

$$P(r) = \frac{3^{2/3} \pi^{4/3}}{5} \frac{\hbar^2}{m} [n(r)]^{5/3}. \quad (1.137)$$

(д) Используя выражения (1.137) и (1.127), получить соотношение между электростатическим потенциалом  $\phi(r)$  и электронной плотностью  $n(r)$ .

### Решение

Подставляя (1.137) в (1.127) и интегрируя, получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n(r)]^{2/3} = e[\phi(r) - \phi_0], \quad (1.138)$$

где  $\phi_0$  — постоянная интегрирования. Формула (1.138) представляет собой основное содержание модели Томаса–Ферми.

Комбинируя соотношение (1.138) с уравнением Пуассона

$$\nabla^2 \phi(r) = 4\pi e n(r), \quad (1.139)$$

можно получить два независимых уравнения для двух неизвестных функций  $\phi(r)$  и  $n(r)$ , а значения этих функций для различных  $r$  могут быть получены численным методом, принимая во внимание соответствующие граничные условия (см., например, [Bransden и Joachain (2003), Landau и Lifshitz (1977)], или [Messiah (1966)]).

## 1.8. Электроны в оболочке

В этой задаче [Budker (1998a)], целью которой является демонстрация базовых идей метода Томаса–Ферми, мы рассмотрим случай большого числа электронов при нулевой температуре, помещенных в сферическую полость радиуса  $a$  с непроницаемыми стенками. Это — как атом без ядра (стенки необходимы для того, чтобы не дать электронам разлететься под действием электростатического растал-

кивания). В следующей задаче мы, пренебрегая численными коэффициентами вроде  $4\pi$ , сосредоточимся на масштабировании различных эффектов. Предположим, что  $a \gg a_0$ , где  $a_0 = \hbar^2/(me^2)$  — боровский радиус. Заметим, что модель Томаса–Ферми (задача (1.7)) в таких условиях применима.

**(а)** Показать, что электроны локализуются в тонком слое толщины  $\delta$  у границы сферической полости. Оценить масштаб  $\delta$  в зависимости от числа электронов  $N$  и радиуса полости  $a$ .

**(б)** При каких  $N$  становится несправедливым предположение о том, что электроны являются нерелятивистскими?

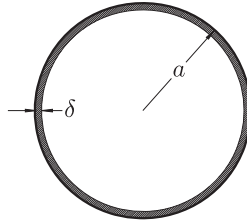


Рис. 1.7. Электроны собираются в слое толщины  $\delta$  около стенки

**(в)** Какова минимальная величина  $N$ , при которой еще справедливы допущения модели Томаса–Ферми? Оценить  $\delta$  для случая малого числа  $N$ .

### Подсказка

В п. (а) принять, что в оболочке содержится половина электронов полости.

### Решение

В этой задаче граничные условия, очевидно, радикальным образом отличаются от граничных условий для атома: здесь отсутствует положительно заряженное ядро, и высота потенциального барьера при  $r = a$  бесконечна. Задав электростатический потенциал на границе равным, например, нулю ( $\phi = 0$ ), функции  $\phi(r)$  и  $n(r)$  можно получить путем численного интегрирования уравнения Томаса–Ферми.

Общее представление о распределении электронов в полости мы, однако, можем получить, не прибегая к детальным расчетам. Рассмотрим слой толщины  $\delta$ , прилегающий к стенке полости и содержащий половину полного числа электронов (как мы увидим,  $\delta \ll a$ ). Кулоновское расталкивание электронов стремится сжать слой, прижимая его к стенке полости. Мы определяем кулоновское давление  $P_C$  как силу отталкивания ( $\sim N^2 e^2 / a^2$ ), действующую на единичную площадку слоя:

$$P_C \sim \frac{N^2 e^2}{a^4}. \quad (1.140)$$

В равновесии это кулоновское давление уравнивается давлением Ферми  $P$  из уравнения (1.136) задачи 1.7,

$$P \sim \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{N}{a^3 \delta} \right)^{5/3}, \quad (1.141)$$

где мы совершили замену  $V \sim a^2\delta$ . Принимая, что  $P = P_C$ , мы находим

$$\delta \sim \frac{a^{2/5} a_0^{3/5}}{N^{1/5}}. \quad (1.142)$$

Как видно из выражения (1.142),  $\delta \ll a$  и, действительно, электроны локализируются в тонком слое на краю полости. Интересно, что толщина этого слоя уменьшается с ростом числа электронов в полости.

**(б)** Предположение о том, что электроны являются нерелятивистскими, становится несправедливым, когда импульс Ферми  $p_F$  становится порядка  $mc$ . Подставляя (1.142) в выражение для  $p_F$  (см., формулу (1.133)) и предполагая, что объем слоя  $\sim a^2\delta$ , мы получаем выражение, описывающее зависимость импульса Ферми от  $N$ :

$$p_F \sim \hbar \frac{N^{2/5}}{a^{4/5} a_0^{1/5}}. \quad (1.143)$$

Принимая, что  $p_F = mc$ , мы находим, что критическое число электронов  $N^*$ , для которого нерелятивистское приближение перестает быть справедливым, равно

$$N^* \sim \left( \frac{a^2}{a_0^2} \right) \alpha^{-5/2}, \quad (1.144)$$

где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры.

**(в)** Для того чтобы определить, при каких значениях  $N$  справедливо полуклассическое приближение, предположим, что мы постепенно увеличиваем число электронов внутри полости. При низких плотностях все электроны занимают нижайшее радиальное состояние, что означает, что полуклассическое приближение справедливо (задача 1.7). Следовательно при низких плотностях большая часть кинетической энергии электронов обусловлена радиальным движением.

В этом режиме мы можем оценить толщину содержащего электроны слоя  $\delta$  определяя минимум полной энергии  $E = K + U$ , где  $K$  — кинетическая энергия, а  $U$  — потенциальная энергия, связанная с кулоновским отталкиванием между электронами. Для величины  $\delta$ , соответствующей минимальной энергии,

$$\frac{\partial K}{\partial \delta} + \frac{\partial U}{\partial \delta} = 0. \quad (1.145)$$

Согласно соотношению неопределенности Гейзенберга,

$$\Delta p_r \delta \sim \hbar, \quad (1.146)$$

где  $\Delta p_r$  — неопределенность радиальной составляющей импульса электрона. Это свидетельствует о том, что кинетическая энергия радиального движения, которая, как отмечалось выше, вносит доминирующий вклад в  $K$ , равна

$$N(\Delta p_r)^2/m \sim \frac{N\hbar^2}{m\delta^2} \sim K. \quad (1.147)$$

Следовательно,

$$\frac{\partial K}{\partial \delta} \sim -\frac{N\hbar^2}{m\delta^3}. \quad (1.148)$$

Кулоновскую энергию слоя можно оценить по величине работы, которую надо совершить, чтобы переместить электроны от края полости на величину  $\sim \delta$ :

$$U \sim \frac{N^2 e^2}{a^2} \delta, \quad (1.149)$$

отсюда находим:

$$\frac{\partial U}{\partial \delta} \sim \frac{N^2 e^2}{a^2}. \quad (1.150)$$

Из (1.146), (1.148) и (1.150) следует оценка

$$\delta \sim \frac{a^{2/3} a_0^{1/3}}{N^{1/3}}, \quad (1.151)$$

сопоставление которой с (1.142) обнаруживает существенное различие двух рассмотренных режимов.

Чтобы удовлетворить принципу Паули, состояния с различным угловым моментом  $l$  должны возбуждаться по мере роста числа электронов в полости. Принимая, что полное число электронных состояний равно числу частиц  $N$ , мы имеем (см. (1.125)):

$$N = \sum_{l=0}^L (2l+1) \sim L^2, \quad (1.152)$$

где  $L$  — наибольшее из возбужденных орбитальных состояний  $l$ .

По мере дальнейшего роста  $N$ , в некоторый момент кинетическая энергия, связанная с орбитальным движением электронов с угловым моментом  $L$ , становится равной кинетической энергии радиального движения:

$$\frac{\hbar^2 L^2}{ma^2} \sim \frac{\hbar^2}{m\delta^2}. \quad (1.153)$$

При больших значениях  $N$  становится энергетически выгодным возбуждать более высокие радиальные моды, соответствующие переходу к режиму Томаса–Ферми, рассмотренному в п. (а). Из выражений (1.152), (1.161) и (1.153) можно получить нижнюю границу  $N$  числа  $N^{**}$ , для которого применимо приближение Томаса–Ферми:

$$N^{**} \sim \frac{a^2}{a_0^2}. \quad (1.154)$$

Любопытно, что эта величина соответствует поверхностной плотности около одного электрона на площадь, равную квадрату радиуса Бора.

Ситуацию, рассмотренную в этой задаче, трудно реализовать экспериментально, поскольку все материалы состоят из атомов, и непроницаемые стенки являются нереальными. Однако такая ситуация может оказаться реальной для квазичастиц в физике конденсированного состояния.

## 1.9. Изотопический сдвиг и диаграмма Кинга

В атомных спектрах энергии переходов различных изотопов обнаруживают малые сдвиги. Такие *изотопические сдвиги* возникают вследствие различий в массах и объемах ядер. Общепринятый метод разделения экспериментально измеряемых изотопических сдвигов на вклады массового и объемного (полевого) сдвигов известен как диаграмма Кинга [King (1963)].

Рассмотрим две спектральные линии  $A$  и  $B$ . Вследствие изотопических сдвигов резонансные частоты слегка различны для разных изотопов. Для пар изотопов, для которых разница в числе нейтронов  $\Delta N$  всегда одна и та же <sup>1)</sup>, и  $\Delta N$  много меньше атомной массы, можно принять, что

— изотопический сдвиг, связанный с конечностью размеров ядра, может быть выражен как произведение электронного множителя  $E$  (различного для линий  $A$  и  $B$ , но один и тот же для каждой пары изотопов в данной спектральной линии) на ядерный объемный множитель  $V$  (различный для каждого изотопа пары, но не зависящий от того, на какой линии ведутся измерения), и

— эффекты массы  $M$  одинаковы для любой линии для всех пар изотопов <sup>2)</sup>.

Из этих допущений следует, что зависимость изотопических сдвигов пар изотопов в спектральной линии  $B$  от сдвигов этих же пар в линии  $A$  выражается прямой линией.

В табл. 1.2 представлены экспериментальные данные об изотопических сдвигах двух линий самария [Brand и др. (1978)]. Эксперимент использовал лазерное возбуждение атомного пучка. Лазерный и атомный пучки пересекались под прямым углом, причем регистрировалась флуоресценция, наблюдаемая ортогонально обоим пучкам. В этих условиях минимизировалось доплеровское уширение спектральных линий (см., например, задачу 3.6).

(а) Вывести уравнение прямой через величины  $E_A$ ,  $E_B$ ,  $M_A$  и  $M_B$ .

(б) Используя данные табл. 1.2, построить диаграмму Кинга для переходов  ${}^7F_0 \rightarrow {}^7D_1$  (598,97 нм) в качестве линии  $A$  и  ${}^7F_1 \rightarrow {}^7H_2$  (562,18 нм) в роли линии  $B$ .

(в) Массовый сдвиг  $M$  состоит из двух составляющих:

$$M = M^{(\text{нмс})} + M^{(\text{амс})}, \quad (1.155)$$

где индексы (нмс) и (амс) соответствуют аббревиатурам «нормальный массовый сдвиг» и «аномальный массовый сдвиг». Первая составляющая отвечает тому факту, что все атомные энергетические интервалы пропорциональны *приведенной* массе электрона, а не собственно массе электрона. Вторая составляющая связана с корреляцией импульсов различных электронов. Аномальный сдвиг можно трактовать как результат образования многоэлектронных «квазичастиц», которые двигаются вокруг ядра [King (1984)].

<sup>1)</sup> Если разница в числе нейтронов не одна и та же, мы всегда можем нормализовать изотопические сдвиги, например, на  $\Delta N = 1$  или 2.

<sup>2)</sup> Точнее, следует учитывать изменение массового сдвига с массой ядра. Поскольку мы здесь предполагаем, что  $\Delta N$  много меньше массы атома, это можно сделать путем введения малого поправочного множителя, которым в данной задаче можно пренебречь.

Таблица 1.2

Изотопический сдвиг (ИС) для различных пар изотопов Sm на переходах  ${}^7F_1 \rightarrow {}^7H_2$  (562,18 нм) и  ${}^7F_0 \rightarrow {}^7D_1$  (598,97 нм). Таблица показывает разности частот переходов: например, точное значение частоты линии 562,18 нм для изотопа  ${}^{144}\text{Sm}$  на 3093,6 МГц выше, чем для изотопа  ${}^{148}\text{Sm}$

Пара изотопов	ИС (МГц) для 562,18 нм	ИС (МГц) для 598,97 нм	$\Delta N$
(144,148)	3093,6(16)	−2794,4(17)	4
(148,150)	1938,3(15)	−1641,2(13)	2
(150,152)	2961,0(15)	−2308,0(19)	2
(152,154)	1362,3(11)	−1242,4(17)	2
(147,148)	970,4(7)	−826,0(4)	1
(148,149)	473,3(4)	−493,8(4)	1

Используя эмпирическую информацию о том, что (амс) вклад в линию 598,97 нм перехода  ${}^7F_0 \rightarrow {}^7D_1$  пренебрежимо мал, оценить массовый сдвиг линии  ${}^7F_1 \rightarrow {}^7H_2$  (562,18 нм). Сравнить величины и знаки ожидаемого нормального массового сдвига.

### Решение

(а) Будем рассматривать изотопический сдвиг линии  $A$  как независимую переменную  $x$ , а изотопический сдвиг линии  $B$  как независимую переменную  $y$ . Используя принятые в этой задаче допущения, мы получаем для изотопических сдвигов:

$$x = E_A V_i + M_A, \quad (1.156)$$

$$y = E_B V_i + M_B, \quad (1.157)$$

где  $i$  — индекс для пары изотопов. Используя соотношение (1.156), мы можем выразить  $V_i$  через  $x$ ,  $E_A$  и  $M_A$ :

$$V_i = \frac{1}{E_A} x - \frac{M_A}{E_A}. \quad (1.158)$$

Подставляя это выражение в формулу для  $y$  (1.157), имеем

$$y = \frac{E_B}{E_A} x + M_B - \frac{E_B}{E_A} M_A. \quad (1.159)$$

(б) Поделив все изотопические сдвиги на разность чисел нейтронов для данной пары (см. табл. 1.2), мы получаем диаграмму Кинга, изображенную на рис. 1.8. Как видно, точки действительно укладываются на прямую линию.

(в) Начнем с оценки нормального массового сдвига. Для одноэлектронного атома конечную массу ядра можно учесть, используя решение для бесконечно тяжелого ядра и заменяя массу электрона приведенной массой  $\mu_{\text{red}}$ :

$$\mu_{\text{red}} = \frac{m M_N A}{m + M_N A}, \quad (1.160)$$

где  $M_N$  — масса нуклона и  $A$  — атомное массовое число. Поскольку энергии всех атомных состояний пропорциональны этой массе, переход, соответствующий

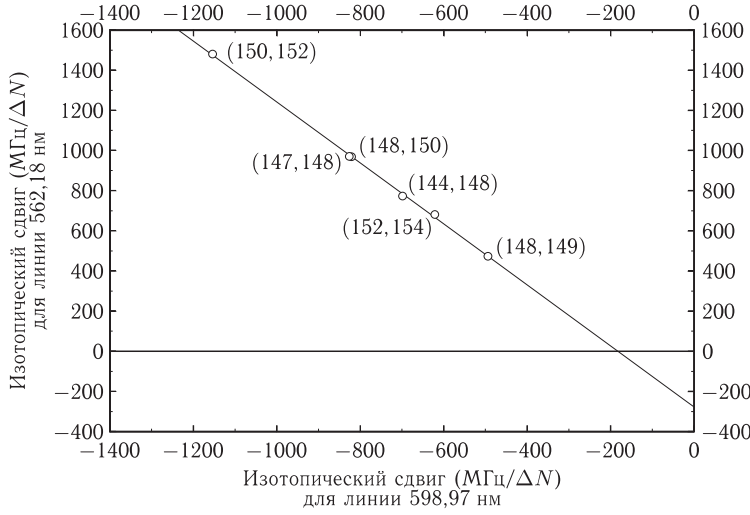


Рис. 1.8. Диаграмма Кинга для переходов самария, рассмотренных в табл. 1.2

изотопу с массовым числом  $A$ , смещен относительно перехода (фиктивного) изотопа с бесконечной массой ядра на величину

$$\begin{aligned}\Delta\omega &= \frac{\omega_0}{m}(\mu_{\text{red}} - m) = \omega_0 \left( \frac{M_N A}{m + M_N A} - 1 \right) \approx \\ &\approx -\frac{m}{M_N A} \omega_0.\end{aligned}\quad (1.161)$$

Переходы изотопов  $A$  и  $A + \Delta N$  сдвинуты на величину

$$\begin{aligned}\Delta\omega' &= \omega_0 \left( -\frac{m}{M_N A + M_N \Delta N} + \frac{m}{M_N A} \right) \approx \\ &\approx \omega_0 \frac{m \Delta N}{M_N A^2},\end{aligned}\quad (1.162)$$

где мы воспользовались тем обстоятельством, что  $\Delta N \ll A$ . Для рассматриваемых здесь оптических переходов, лежащих вблизи 600 нм, с  $\Delta N = 1$  (как на приведенной на рис. 1.8 диаграмме Кинга), для этой величины имеем

$$\Delta\omega' \approx 5 \cdot 10^{14} \text{ Гц} \frac{1}{1836 \times 150^2} \approx 12 \text{ МГц}.\quad (1.163)$$

Массовый сдвиг линии 598,97 нм, в нашем случае, дается выражением

$$M_A = M_A^{(\text{nms})} + M_A^{(\text{sms})}.\quad (1.164)$$

Мы показали, что  $M_A^{(\text{nms})} \sim 12 \text{ МГц}$ , тогда как согласно эмпирическим данным  $M_A^{(\text{sms})}$  пренебрежимо мал. Из  $y$ -пересечения диаграммы Кинга и соотношения (1.159) мы находим, что  $M_B - (E_B/E_A)M_A \approx -280 \text{ МГц}$ . Наклон прямой диаграммы Кинга показывает, что  $(E_B/E_A) \approx -1,5$ , и мы получаем, что массовый сдвиг составляет  $\approx -300 \text{ МГц}$  для линии 562,18 нм, что отличается от нормального массового сдвига большей величиной и противоположным знаком. Такие неожиданно большие вклады

удельного массового сдвига часто обнаруживают редкоземельные элементы, в которых число  $f$ -электронов для верхнего и нижнего состояний оказывается различным (линия 562,18 нм номинально соответствует переходу между электронными конфигурациями  $4f^6 6s^2$  и  $4f^5 5d 6s^2$ ).

### 1.10. Грубая модель отрицательного иона

Однократнозаряженные отрицательные ионы ( $K = 1$ ) встречаются довольно часто [Massey (1976)]. Описаны также наблюдения некоторых двукратнозаряженных ( $K = 2$ ) отрицательных ионизованных атомов (см. [Massey (1976), гл. 5.8]) и кластеров [Vandenbosch и др. (1997)]. Тот факт, что такие системы должны быть связанными, не представляется вполне очевидным. Можно было бы ожидать, что кулоновское отталкивание лишнего электрона от исходных  $Z$  электронов преодолееет притяжение этого электрона к ядру. Мы сейчас рассмотрим грубую модель, которая покажет, что такое рассуждение не обязательно справедливо.

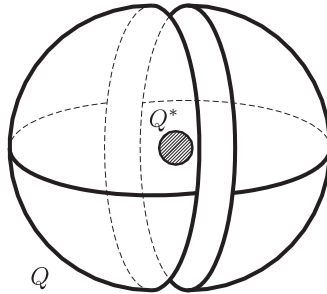


Рис. 1.9. Заряд  $Q^*$  может удерживать части проводящей сферы, несущей заряд  $Q$

Используя электростатическую аналогию, объяснить, почему возможны связанные состояния положительного ядра с зарядом  $+Z$  с электронным облаком с зарядом  $-(Z + K)$ ,  $K > 0$ .

#### Подсказка

В качестве очень грубой модели атома будем рассматривать электроны как проводящую оболочку и будем пренебрегать *обменным взаимодействием* между электронами (см. задачу 1.2). Несмотря на то что обменное взаимодействие во многих случаях является чрезвычайно важным, эта простая модель позволяет проиллюстрировать те фундаментальные принципы, которые обеспечивают возможность существования отрицательных ионов.

#### Решение

Рассмотрим следующую задачу электростатики. Пусть мы имеем тонкий сферический проводящий слой с зарядом  $Q$ . Разрежем сферу на две половины. Поскольку эти части заряжены одноименно, они будут стремиться разлететься в разные стороны. Какой заряд необходимо поместить в центр сферы, чтобы не дать им разлететься?



Чтобы ответить на этот вопрос, мы воспользуемся следующими фактами из электростатики:

- давление, производимое электрическим полем  $E$ , равно  $-E^2/8\pi$ ,
- электрическое поле внутри проводника равно нулю,
- электрическое поле однородно заряженного сферического слоя равно нулю внутри слоя, а снаружи ведет себя таким образом, как если бы весь заряд был помещен в центр сферы.

Если в центре нет заряда, то внутри сферы нет поля, и две части «отсасываются» друг от друга отрицательным давлением наружного поля. Все, что нужно сделать, чтобы скомпенсировать отрицательное внешнее давление, это поместить в центр заряд (назовем его  $Q^*$ ) такой величины, что поле внутри сферической оболочки (вблизи ее поверхности) будет таким же, как снаружи. Поле внутри сферы дается формулой  $Q/R^2$  ( $R$  — радиус оболочки, который, разумеется, будет исключен). Поле снаружи —  $(Q + Q^*)/R^2$ . Если мы хотим согласовать величины полей внутри и снаружи оболочки, нужно обеспечить выполнение равенств

$$Q^* = -(Q + Q^*) \Rightarrow Q^* = -Q/2. \quad (1.165)$$

Таким образом, любой заряд, знак которого противоположен знаку  $Q$ , а величина превосходит  $|Q|/2$ , помещенный в центр, способен удержать систему.

### 1.11. Смешивание состояний с различными $J$ за счет сверхтонкого взаимодействия

Два уровня тонкой структуры многоэлектронного атома  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$  разделены энергетическим интервалом  $\Delta E$ . Ядерный спин системы  $I = 1/2$ .

Определить примесь состояния  $^2P_{3/2}$ ,  $F = 1$  в состоянии, номинально,  $^2P_{1/2}$ ,  $F = 1$ , если энергетическое расстояние  $\Delta E_{\text{hf}}$  между уровнями сверхтонкой структуры  $^2P_{3/2}$ ,  $F = 1$  и  $^2P_{3/2}$ ,  $F = 2$  удовлетворяет неравенству  $\Delta E_{\text{hf}} \ll \Delta E$ . Допустим, что сверхтонкое взаимодействие описывается гамильтонианом вида<sup>1)</sup>

$$H_{\text{hf}} = a \vec{I} \cdot \vec{S}. \quad (1.166)$$

Индукцированное сверхтонким взаимодействием смешивание состояний с различными  $J$  является важным, например, для понимания характера сверхтонких расщеплений в ситуациях, когда расщепления тонкой структуры относительно малы.

<sup>1)</sup> В общем случае выражение для сверхтонкого гамильтониана, описывающее взаимодействие магнитного момента ядра с одним атомным электроном, имеет вид [Sobelman (1992), раздел 6.2.2]:

$$H_{\text{hf}} = a_l \vec{l} \cdot \vec{I} - a_l [\vec{s} - 3(\vec{s} \cdot \hat{r})\hat{r}] \cdot \vec{I},$$

где  $\vec{r}$  — единичный вектор, направленный вдоль  $\vec{r}$ , а  $a_l$  — константа, пропорциональная  $\langle r^{-3} \rangle$ . Для многоэлектронных атомов общее выражение для сверхтонкого расщепления включает в себя два вклада: один — пропорциональный  $\vec{I} \cdot \vec{S}$ , а второй — пропорциональный  $\vec{I} \cdot \vec{L}$ . Относительная важность этих двух вкладов зависит от конкретной электронной конфигурации. Например, в двухэлектронном атоме, когда один электрон находится в основном состоянии, а другой — в возбужденном состоянии с  $l \geq 1$ , вклад, пропорциональный  $\vec{I} \cdot \vec{S}$ , является доминирующим [Bethe и Salpeter (1977)].

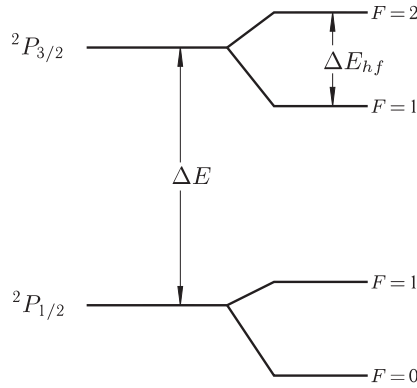


Рис. 1.10. Схема уровней энергии для двух состояний тонкой структуры атомов —  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$  — со сверхтонким расщеплением (спин ядра  $-1/2$ )

Это происходит в некоторых возбужденных состояниях гелия и Не-подобных атомов [Bethe и Salpeter (1997), раздел 44]. Другим примером служат индуцированные сверхтонким взаимодействием переходы между двумя состояниями с номинальным значением  $J$ , равным нулю (см., например, [Fischer и др. (1997), раздел 9.12] и [Birkett и др. (1993)]).

### Подсказка

Обратить внимание на то, что гамильтониан, описывающий сверхтонкое взаимодействие, не смешивает состояния с различными  $F$  или  $M_F$  по той причине, что это скалярный оператор (см. Приложение F).

### Решение

Прежде всего, пренебрегая смешиванием состояний с различным  $J$ , свяжем  $\Delta E_{hf}$  с коэффициентом  $a$  из уравнения (1.166). Заметим, что состояние  $^2P_{3/2}$ ,  $F=2$  соответствует максимально возможной проекции векторов  $\vec{L}$ ,  $\vec{S}$  и  $\vec{I}$  на каждый из остальных. Следовательно, среднее значение  $\vec{I} \cdot \vec{S}$  в этом состоянии равно просто  $1/4$ .

Несмотря на то, что сверхтонкое расщепление определяется в этой задаче, в первую очередь, членом  $a\vec{I} \cdot \vec{S}$ , мы по-прежнему можем написать, пользуясь обычными формулами для сверхтонкой структуры,

$$E_F = \frac{A}{2}[F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)], \quad (1.167)$$

$$\Delta E_{hf} = E_F - E_{F-1} = AF, \quad (1.168)$$

где  $A$  — постоянная сверхтонкой структуры, а  $E_F$  обозначают сверхтонкие сдвиги уровней энергии. Это возможно потому, что  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  — векторные операторы (см. Приложение F), так что  $\langle \vec{S} \rangle \propto \langle \vec{J} \rangle$  и  $\langle \vec{L} \rangle \propto \langle \vec{J} \rangle$ , и мы можем написать

$$E_F = \langle H_{hf} \rangle = A \langle \vec{I} \cdot \vec{J} \rangle, \quad (1.169)$$

откуда получаем формулы (1.167) и (1.168). В нашем случае ( $J = 3/2$ ,  $I = 1/2$ ,  $F = 2, 1$ ), и из этих формул мы получаем:

$$A = \Delta E_{\text{hf}}/2, \quad (1.170)$$

$$E_{F=2} = \frac{3}{8} \Delta E_{\text{hf}}. \quad (1.171)$$

Теперь мы воспользуемся тем фактом, что доминирующий вклад в сверхтонкое расщепление задается членом  $a\vec{I} \cdot \vec{S}$ , и напомним

$$E_{F=2} \approx a\langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle, \quad (1.172)$$

что дает

$$a \approx \frac{3}{2} \Delta E_{\text{hf}}. \quad (1.173)$$

Оценим теперь элемент матрицы сверхтонкого взаимодействия между состояниями  $F = 1$ . Как отмечалось выше, взаимодействие (1.166) может смешивать только состояния с одинаковыми значениями  $F$  и  $M_F$ . Мы проведем явные вычисления для  $M_F = 1$ ; однако, в силу изотропности пространства, результат не должен зависеть от  $M_F$ . Нам нужно записать эти состояния в базисе  $|L, M_L\rangle|M_S\rangle|M_I\rangle$ . Мы делаем это путем разложения в базисе  $|J, M_J\rangle|M_I\rangle$  (с помощью коэффициентов Клебша–Гордона):

$$|^2P_{3/2}, F = 1, M_F = 1\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|3/2, 3/2\rangle|-\rangle_I - \frac{1}{2}|3/2, 1/2\rangle|+\rangle_I, \quad (1.174)$$

$$|^2P_{1/2}, F = 1, M_F = 1\rangle = |1/2, 1/2\rangle|+\rangle_I. \quad (1.175)$$

Затем, используя разложение в базисе  $|L, M_L\rangle|M_S\rangle|M_I\rangle$ , имеем

$$\begin{aligned} |^2P_{3/2}, F = 1, M_F = 1\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2}|1, 1\rangle|+\rangle_S|-\rangle_I - \\ &- \frac{1}{2\sqrt{3}}|1, 1\rangle|-\rangle_S|+\rangle_I - \frac{1}{\sqrt{6}}|1, 0\rangle|+\rangle_S|+\rangle_I, \end{aligned} \quad (1.176)$$

$$|^2P_{1/2}, F = 1, M_F = 1\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle|-\rangle_S|+\rangle_I - \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0\rangle|+\rangle_S|+\rangle_I. \quad (1.177)$$

Теперь оценим матричный элемент  $\vec{I} \cdot \vec{S}$  между состояниями (1.176) и (1.177). Один из способов выполнить эти расчеты состоит в том, чтобы выразить  $\vec{I} \cdot \vec{S}$  через операторы повышения и понижения для угловых моментов  $\vec{I}$  и  $\vec{S}$  (см., например, [Griffiths (1995)]):

$$I_{\pm} = I_x \pm iI_y, \quad (1.178)$$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y, \quad (1.179)$$

где

$$I_{\pm}|I, M_I\rangle = \sqrt{I(I+1) - M_I(M_I \pm 1)} |I, M_I \pm 1\rangle, \quad (1.180)$$

$$S_{\pm}|S, M_S\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S \pm 1)} |S, M_S \pm 1\rangle. \quad (1.181)$$

Пользуясь выражениями (1.178) и (1.179), мы находим, что

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = I_x S_x + I_y S_y + I_z S_z = \frac{1}{2}(I_+ S_- + I_- S_+) + I_z S_z. \quad (1.182)$$

Используя выражения для атомных состояний в базисе  $|L, M_L\rangle|M_S\rangle|M_I\rangle$  (формулы (1.176) и (1.177)) вместе с соотношениями (1.180)–(1.182), получаем

$$\langle {}^2P_{3/2}, F=1, M_F=1 | a\vec{I} \cdot \vec{S} | {}^2P_{1/2}, F=1, M_F=1 \rangle = \frac{2}{3} \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad (1.183)$$

$$\langle {}^2P_{3/2}, F=1, M_F=1 | a\vec{I} \cdot \vec{S} | {}^2P_{1/2}, F=1, M_F=1 \rangle = \frac{\Delta E_{\text{hf}}}{\sqrt{2}}. \quad (1.184)$$

Наконец, находим смешанное состояние  $|\widetilde{{}^2P_{1/2}}, F=1\rangle$  из теории возмущений первого порядка:

$$|\widetilde{{}^2P_{1/2}}, F=1\rangle \approx |{}^2P_{1/2}, F=1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Delta E_{\text{hf}}}{\Delta E} |{}^2P_{3/2}, F=1\rangle. \quad (1.185)$$

Мы видим, что, с точностью до численного коэффициента, амплитуда смешивания состояний с различными  $J$  определяется отношением величины расщепления сверхтонкой структуры к расщеплению тонкой структуры.

## 1.12. Электронная плотность на ядре (У)

В атомной физике существует ряд явлений, определяемых плотностью электронов на ядре. Среди них — сверхтонкое расщепление (см. задачи 1.4 и 2.5), изотопические сдвиги (задача 1.9) и несохранение четности (задача 1.13). В данной задаче мы определяем характер зависимости электронной плотности на ядре от  $Z$  ( $r \approx 0$ ) для валентных электронов  $s$ - и  $p$ -волн в тяжелых нейтральных многоэлектронных атомах. Этот результат был впервые получен в работе [Fermi и Segrè (1933)]. Нижеприведенное рассмотрение в основных чертах воспроизводит решение из работ [Landau и Lifshitz (1977)] и [Khriplovich (1991)].

**(а)** Начнем с рассмотрения свойств валентного электрона.

Пусть один валентный электрон тяжелого многоэлектронного атома первоначально находится на расстоянии  $\gtrsim a_0$  от ядра. Пусть также электроны остова оболочки располагаются на расстояниях  $\lesssim a_0$ .

### Решение

Представим себе, что мы начинаем строить многоэлектронный атом с ядра, лишённого электронов, последовательно добавляя по одному электрону. Первый добавленный электрон создаст водородоподобный ион, и среднее расстояние электрона от ядра  $\langle r \rangle$  составит  $\approx a_0/Z$ , как было показано в задаче 1.5. По мере того как мы продолжаем добавлять электроны, поскольку ядро экранируется предыдущими электронами, каждый последующий электрон оказывается связанным с ядром слабее, чем предыдущий. В соответствии с такой простой картиной, мы приходим к заключению, что  $\langle r \rangle$  имеет большее значение для валентных электронов, чем для любого из других электронов (остова), т. е. валентный электрон действительно явля-

ется электроном внешним<sup>1)</sup>. Непосредственно перед тем, как добавляется последний валентный электрон, мы имеем ядро с зарядом  $+Ze$ , окруженное приблизительно сферически симметричным остовом из  $Z - 1$  электронов. На большом расстоянии эта конструкция выглядит в точности как ядро атома водорода. Следовательно, можно ожидать, что валентный электрон будет вращаться вокруг ядра на расстоянии  $\sim a_0$ .

Пользуясь известными данными о химических связях и радиусах различных атомов, мы можем заметить, что атомные радиусы не обнаруживают сильной зависимости от  $Z$ , а длины валентных связей составляют несколько радиусов Бора. Поскольку именно валентные электроны формируют химические свойства элемента и определяют радиус атома, мы можем утверждать, пользуясь этими эмпирическими фактами, что валентный электрон проводит большую часть времени на расстоянии  $\gtrsim a_0$  от ядра.

К этому заключению можно также прийти, пользуясь моделью Томаса–Ферми (задача 1.7).

**(б)** Что можно сказать, используя результаты п. (а), о волновой функции валентного  $s$ -электрона в области расстояний  $\gtrsim a_0$  от ядра?

### Решение

Мы узнали, что валентный электрон проводит большую часть времени за пределами расстояний  $a_0$ , а большинство электронов остова находятся на расстояниях меньших  $a_0$ . Электроны остова экранируют заряд ядра в области  $r \gtrsim a_0$ , так что волновая функция валентного  $s$ -электрона за пределами  $a_0$  аналогична волновой функции  $1s$ -состояния атома водорода (поскольку ядро плюс электроны остова в этом диапазоне видится как ядро с зарядом  $+e$ ):

$$\boxed{\psi_s(r) \approx C e^{-r/a_0}}, \quad (1.186)$$

где  $C$  — постоянная, практически не зависящая от  $Z$ . Эта независимость от  $Z$  следует из того факта, что

$$4\pi \int_0^\infty |\psi_s(r)|^2 r^2 dr \sim \pi C^2 a_0^3 \sim 1. \quad (1.187)$$

Хотя, как мы увидим, существует определенная ненулевая вероятность обнаружить электрон вблизи ядра, поскольку валентный электрон в основном находится на расстояниях от ядра, больших  $a_0$ , выражение (1.187) в общем случае является хорошим приближением.

**(в)** Рассмотрим теперь область в окрестности ядра. На каком расстоянии от ядра его заряд полностью перестает экранироваться электронами остова? Какова форма волновой функции валентного  $s$ -электрона в этой области?

---

<sup>1)</sup> В случае нескольких валентных электронов этот аргумент не обязательно справедлив. Например, в сложных валентных оболочках переходных и редкоземельных металлов валентные  $d$  и  $f$ -электроны связаны с ядром сильнее, чем валентные  $s$ -электроны. По этой причине химические свойства всех редкоземельных элементов (определяясь преимущественно валентными  $s$ -электронами) очень близки друг к другу.

### Решение

Мы знаем, что радиус водородоподобного иона равен  $a_0/Z$  (см. задачу 1.5). Дополнительные электроны будут иметь более высокую энергию и, следовательно, находиться на расстояниях  $\gtrsim a_0/Z$  от ядра. Таким образом, для

$$r \lesssim \frac{a_0}{Z} \quad (1.188)$$

мы можем считать ядро полностью незэкранированным<sup>1)</sup>. В этой области

$$\psi_s(r) = Ae^{-Zr/a_0}, \quad (1.189)$$

где постоянная  $A$  характеризуется зависимостью от  $Z$ , о которой пойдет речь ниже.

(г) Показать, что между этими двумя областями электрон является квазиклассическим (удовлетворяющим условиям применимости приближения ВКБ<sup>2)</sup>) и выразить волновую функцию в этой области через  $r$  и импульс электрона.

### Решение

Для того чтобы удовлетворить допущениям ВКБ-приближения, волновая функция должна осциллировать много раз на расстоянии, где потенциальная энергия испытывает значительные изменения. Это означает, что длина волны де Бройля

$$\lambda_{dB} = 2\pi \frac{\hbar}{p} \quad (1.190)$$

должна меняться медленно в масштабе расстояния до ядра:

$$\frac{\partial \lambda_{dB}}{\partial r} \ll 1. \quad (1.191)$$

ВКБ приближение не применимо, когда

$$r \gtrsim a_0, \quad (1.192)$$

поскольку электронная волновая функция в этой области не осциллирует.

В области  $r \ll a_0$  ядерный заряд не достаточно хорошо экранируется электронами остова. Таким образом, мы можем получить грубую оценку для эффективного заряда ядра:  $Z_{\text{eff}}(r) \sim Z$ . Поскольку полная энергия валентного электрона достаточно мала ( $\sim 1$  эВ), мы получаем, что кинетическая энергия электрона в этой области приблизительно равна  $Ze^2/r$ . Используя классическое приближение для электрона в этой области, получаем

$$p(r) \sim \sqrt{\frac{mZe^2}{r}}. \quad (1.193)$$

<sup>1)</sup> Модель Томаса–Ферми фактически, показывает, что экранирование ядра становится пренебрежимым для значительно большего радиуса  $r \ll a_0 Z^{-1/3}$ , но выражение (1.188) является достаточно точным для наших целей.

<sup>2)</sup> Это приближение обозначается по именам Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна, которые впервые применили в квантовой механике этот метод «коротковолнового предела», широко используемый в оптике (см., например, [Griffiths (1995), Bransden и Joachain (1989)] и [Landau и Lifshitz (1977)]. Этот метод фактически может применяться к любой волновой системе.

Таким образом, длина волны де Бройля удовлетворяет приближению

$$\lambda_{\text{dB}}(r) \sim \sqrt{\frac{r a_0}{Z}}, \quad (1.194)$$

так что

$$\frac{\partial \lambda_{\text{dB}}}{\partial r} \sim \sqrt{\frac{a_0}{Z r}}. \quad (1.195)$$

Сравнивая выражения (1.191) и (1.195), и опять отмечая, что ВКБ-приближение неприменимо при  $r \gtrsim a_0$  (1.192), мы видим, что условие применимости ВКБ-приближения удовлетворяется до тех пор, пока

$$\boxed{\frac{a_0}{Z} \ll r \lesssim a_0.} \quad (1.196)$$

Как выглядит такая квазиклассическая волновая функция? Если ввести радиальную функцию  $u(r)$ , такую, что

$$\psi_s(r) = \frac{u(r)}{r}, \quad (1.197)$$

радиальная часть трехмерного уравнения Шрёдингера приобретает вид

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{\text{eff}}] u(r) = 0, \quad (1.198)$$

который в точности совпадает с видом одномерного уравнения Шрёдингера. Квазиклассические решения для одномерного случая имеют вид (см., например, [Griffiths (1995)])

$$u(r) \approx \frac{B}{\sqrt{p}} e^{\pm(i/\hbar) \int p(r) dr}, \quad (1.199)$$

где  $B$  — постоянная. В этой задаче мы не интересовались фазовым множителем. Поэтому можно сказать, что в квазиклассической области

$$\boxed{\psi_s(r) \sim \frac{B}{r\sqrt{p}}.} \quad (1.200)$$

**(д)** Используя полученные результаты, определить характер зависимости  $|\psi_s(0)|^2$  по отношению к  $Z$ .

### Решение

Чтобы определить « $Z$ -масштабирование»  $|\psi_s(0)|^2$ , мы используем три решения для  $|\psi_s(0)|$  полученные в пп. (б), (в) и (г). При  $r \sim a_0$ , из соотношений (1.186) и (1.200) получаем:

$$\frac{B}{a_0 \sqrt{\alpha m c}} \sim C e^{-1}. \quad (1.201)$$

Поскольку  $C$  не зависит от  $Z$ , то  $B$  тоже не должно зависеть от  $Z$ .

При  $r \sim a_0/Z$ , мы получаем

$$\frac{Z B}{a_0 \sqrt{Z \alpha m c}} \sim A e^{-1}, \quad (1.202)$$

где мы воспользовались тем фактом, что,  $p \sim Z\alpha mc$  (импульс водородоподобного иона) вблизи  $r \sim a_0/Z$ . Выражение (1.202) показывает, что  $A \propto Z^{1/2}$  и, следовательно,

$$|\psi_s(0)|^2 \approx \frac{Z}{a_0^3}. \quad (1.203)$$

(е) Пользуясь аналогичными рассуждениями, получить приближенный вид функции  $\psi_p(\vec{r})$  вблизи ядра.

### Решение

Для  $p$ -состояния мы можем использовать те же соображения, что мы применяли для определения волновой функции  $s$ -состояния. Пренебрегая угловыми множителями и сохраняя только члены вплоть до  $\mathcal{O}(r)$  (поскольку мы интересуемся поведением волновой функции при  $r \sim 0$ ), мы видим, что волновая функция  $p$ -состояния должна вести себя как

$$\psi_p(r) \sim C_p \frac{r}{a_0} e^{-r/a_0} \quad r \gtrsim a_0, \quad (1.204)$$

$$\sim \frac{B_p}{r\sqrt{p}} \quad \frac{a_0}{Z} \lesssim r \lesssim a_0, \quad (1.205)$$

$$\sim A_p \frac{r}{a_0} e^{-Zr/a_0} \quad r \lesssim \frac{a_0}{Z}. \quad (1.206)$$

Что касается  $s$ -состояний (п. (б) этой задачи), то из-за экранирования заряда ядра электронами остова можно ожидать, что  $C_p$  будет практически не зависеть от  $Z$ . Подгонка решения для  $\psi_p(r)$  при  $r \sim a_0$  показывает, что константа  $B_p$  также не зависит от  $Z$ . Для подгонки решения для функции  $\psi_p(r)$  при  $r \sim a_0/Z$  требуется, чтобы

$$A_p \sim \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}. \quad (1.207)$$

Таким образом при  $r \ll a_0/Z$

$$\psi_p(r) \sim \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-Zr/a_0}. \quad (1.208)$$

### 1.13. Несохранение четности в атомах

До середины 50-х годов физики полагали, что законы природы инвариантны по отношению к операции *пространственной инверсии* (известной как преобразование четности ( $P$ ), которое инвертирует направления всех трех осей координат). Пространственная симметрия меняет право-левую симметрию объекта или процесса (соответствующий английский термин *handedness* проистекает из того наглядного факта, что операция  $P$  превращает перчатку для левой руки в перчатку для правой руки) Пространственная инверсия — это пример дискретного преобразования, в противоположность непрерывным преобразованиям (например любое вращение на конечный угол можно рассматривать как последовательность бесконечно малых поворотов).



В 1956 году вера в  $P$ -инвариантность была разрушена серией экспериментов, показавших практически 100-процентное нарушение этой симметрии в ядерных распадах, связанных со слабым взаимодействием (см., например, [Trigg (1975), гл. 10]).

Когда Glashow (1961), Weinberg (1967) и Salam (1968) разработали то, что впоследствии получило название Стандартной модели электрослабых взаимодействий, они предсказали существование нейтрального слабого взаимодействия, обеспечиваемого частицей под названием  $Z$ -бозон. Еще до появления Стандартной модели Зельдович (1959) заметил, что если бы существовало нарушающее четность слабое электрон-нуклонное взаимодействие нейтральных токов, оно бы интерферировало с обычным электромагнитным взаимодействием в атоме. Сделанная Зельдовичем оценка величины этого эффекта, однако, показала, что он был бы слишком мал, чтобы его можно было измерить с помощью доступных в то время экспериментальных методов.

Позднее, вдохновленные новыми успехами теории слабых взаимодействий и грандиозными достижениями лазерной спектроскопии, Bouchiat и Bouchiat (1974) заново рассмотрели возможности поиска эффектов несохранения четности (НСЧ) в атомных системах. Они обнаружили, что подобные эффекты оказываются значительно усиленными в тяжелых атомах и, в соответствии с предсказаниями Стандартной модели, должны быть наблюдаемы. На базе результатов этого нового анализа множество групп по всему миру приступили к интенсивным экспериментальным поискам эффектов НСЧ.

Первые успешные эксперименты по наблюдению эффектов НСЧ в атомах были проведены Барковым и Золотаревым (1978) в Новосибирске, используя эффект *оптического вращения* в висмуте, и Камминсом с сотрудниками [Conti и др. (1979)] в Беркли, используя метод штарковской интерференции (см. задачу 4.5) в таллии. Эти эксперименты позволили получить убедительные свидетельства существования нейтральных слабых токов и послужили первым указанием на природу нейтрального слабого взаимодействия, связанную с эффектом нарушения четности.

В настоящее время эксперименты по НСЧ в атомах продолжают служить наиболее надежными тестами фундаментальной теории электрослабых взаимодействий и наиболее чувствительными инструментами новой физики [Khriplovich (1991), Bouchiat и Bouchiat (1997), Budker (1998b)].

Самые точные измерения эффектов НСЧ были проведены в Болдере Виманом с сотрудниками [Wood и др. (1997)] на атомах цезия, используя метод штарковской интерференции. В этом эксперименте также впервые были получены неоспоримые свидетельства существования зависящих от ядерного спина эффектов НСЧ, связанных ядерному анапольному моменту (детально обсуждаемому в задаче 1.15). В данной задаче мы ограничим наше рассмотрение эффектами НСЧ, не зависящими от спина ядра.

**(а)** В нерелятивистском приближении и в пределе бесконечной массы  $Z_0$  гамилтониан  $H_w$ , описывающий слабое взаимодействие между ядром и одним электроном, дается выражением [Bouchiat и Bouchiat (1974)]:

$$H_w = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \frac{1}{2m_e\hbar} Q_w \vec{s} \cdot [\vec{p}\delta^3(\vec{r}) + \delta^3(\vec{r})\vec{p}], \quad (1.209)$$

где мы пренебрегли эффектами, зависящими от ядерного спина, и

$$G_F \approx 3 \cdot 10^{-12} mc^2 \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^3 \quad (1.210)$$

— константа Ферми,  $\vec{s}$  — спин электрона,  $\vec{p}$  — импульс электрона, а

$$Q_w = -N + (1 - 4 \sin^2 \theta_w) Z \quad (1.211)$$

— безразмерный *слабый ядерный заряд* ( $N$  — число нейтронов и  $\sin^2 \theta_w \approx 0,23$ , где  $\theta_w$  — угол вейнберовского смешивания).

Показать, что  $H_w$  нарушает четность.

**(б)** Исходя из величины массы  $Z_0$  ( $m_Z = 92,6 \text{ ГэВ}/c^2$ ) оценить масштаб слабого нейтрального взаимодействия.

**(в)** Рассмотреть смешивание состояний противоположной четности  $|ns_{1/2}\rangle$  и  $|n'p_{1/2}\rangle$  (это одночастичные состояния валентного электрона), где  $n$  и  $n'$  — главные квантовые числа. Показать, что в тяжелых атомах смешивание возрастает пропорционально множителю  $Z^3$ .

**(г)** В чем состоит значение того факта, что матричный элемент  $\langle n'p_{1/2} | H_w | ns_{1/2} \rangle$  является чисто мнимым?

**(д)** Вычислить индуцированное НСЧ смешивание состояний  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  в атоме водорода. Напоминаем, что эти состояния расщеплены по энергии лишь на величину лэмбовского сдвига ( $\Delta E \approx 1058 \text{ МГц}$ ).

**(е)** На основе результатов расчета по п. (д) для атома водорода оценить порядок величины индуцированного НСЧ смешивания состояний  $6s_{1/2}$  и  $6p_{1/2}$  атома цезия.

### Подсказки

В п. (г) обратить внимание на тот факт, что, хотя  $H_w$  и нарушает четность, он не нарушает время-инверсионную симметрию (Т). Рассмотреть, в частности, эффект влияния внешнего электрического поля на состояние, не являющееся собственным состоянием оператора четности и показать, что, если матричный элемент  $\langle n'p_{1/2} | H_w | ns_{1/2} \rangle$  не является чисто мнимым, то в системе нарушается Т-инвариантность.

### Решение

**(а)** Чтобы доказать, что  $H_w$  нарушает четность, достаточно показать, что он не коммутирует с оператором четности  $P$ . Если  $[H_w, P] = 0$ , то энергетические состояния атомной системы в общем случае не должны быть собственными состояниями оператора четности. В этом случае состояние с определенной четностью должно быть суперпозицией нескольких собственных состояний оператора энергии. Следовательно, если такая система развивается во времени, то четность состояния будет меняться, т. е. четность не сохраняется.

Как преобразуется  $H_w$  под действием  $P$ ? Поскольку  $H_w \propto \vec{s} \cdot \vec{p}$ , и  $\vec{s}$ , подобно орбитальному угловому моменту, является аксиальным вектором (псевдовектором), который не меняет свой знак при преобразовании  $P$ , тогда как  $\vec{p}$  — полярный вектор, который при этом меняет знак, то

$$P^\dagger H_w P = -H_w. \quad (1.212)$$

Применяя оператор  $P$  к обеим сторонам уравнения (1.212), мы находим, что

$$H_w P = -P H_w. \quad (1.213)$$

Таким образом,  $H_w$  и  $P$  антикоммутируют, что означает, что

$$[H_w, P] = H_w P - P H_w = 2H_w P \neq 0. \quad (1.214)$$

**(б)** Чтобы электрон и ядро могли обмениваться бозоном  $Z_0$ , обмен должен происходить на временах достаточно коротких, чтобы не нарушить закон сохранения энергии. В соответствии с соотношением неопределенности Гейзенберга,

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (1.215)$$

Таким образом, масштаб  $R$  силы слабого взаимодействия определяется выражением

$$R \sim c \Delta t \sim \frac{\hbar c}{\Delta E}. \quad (1.216)$$

Положим  $\Delta E = m_Z c^2$  равным минимальной энергии, необходимой для создания  $Z_0$ . Тогда

$$R \sim \frac{\hbar c}{m_Z c^2} \sim \frac{197.3 \text{ МэВ} \cdot \text{фм}}{92.6 \cdot 10^3 \text{ МэВ}} \sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ фм}. \quad (1.217)$$

Взаимодействие  $H_w$  можно с очень хорошей точностью рассматривать как точечное.

**(в)** В первом порядке теории возмущений, не зависящих от времени, гамильтониан слабого взаимодействия примешивает часть состояния  $|n'p\rangle$  к состоянию  $|ns\rangle$  в соответствии с

$$|\widetilde{ns}_{1/2}\rangle = |ns_{1/2}\rangle + \frac{\langle n'p_{1/2} | H_w | ns_{1/2} \rangle}{\Delta E} |n'p_{1/2}\rangle, \quad (1.218)$$

где  $\Delta E = E_s - E_p$  — энергетический зазор между состояниями (где  $E_s$  — энергия состояния  $|ns_{1/2}\rangle$ ,  $E_p$  — энергия состояния  $|n'p_{1/2}\rangle$ ). Поскольку, как говорилось в п. (б), взаимодействие является точечным, смешивание  $s$ - и  $p$ -состояний зависит от  $s$  и  $p$  волновых функций в близи ядра. Из задачи 1.12 мы получаем для  $s$ -состояния в области  $r \lesssim a_0/Z$

$$\psi_s(r) \sim \frac{\sqrt{Z}}{a_0^{3/2}} e^{-Zr/a_0}, \quad (1.219)$$

где множитель  $a_0^{3/2}$  обеспечивает правильную размерность волновой функции. Для  $p$ -состояния в той же области имеем

$$\psi_p(r) \sim \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-Zr/a_0}. \quad (1.220)$$

Гамильтониан слабого взаимодействия (1.209) содержит два члена. Второй член не вносит вклада в матричный элемент, поскольку

$$\langle n'p_{1/2} | \delta^3(\vec{r}) \vec{s} \cdot \vec{p} | ns_{1/2} \rangle = 0. \quad (1.221)$$

Это следует из того факта, что электрон в  $s$ -состоянии имеет нулевой импульс в начале координат, точно так же, как волновая функция  $p$ -состояния обращается

в ноль при  $r = 0$ . Таким образом существенен только первый член, и матричный элемент между состояниями  $|n'p\rangle$  и  $|ns\rangle$  дается выражением

$$\langle n'p_{1/2}|H_w|ns_{1/2}\rangle \sim \frac{G_F Q_w}{mc} \int \psi_s(r) \left( \delta^3(r) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_p(r) d^3r \sim \quad (1.222)$$

$$\sim -i \frac{G_F Q_w \hbar}{mc} \psi_s(0) \frac{\partial \psi_p}{\partial r} \Big|_0. \quad (1.223)$$

В приведенной оценке мы положили  $\vec{s} \cdot \vec{p} = \hbar p_r/2$ , поскольку детали углового распределения импульса  $p$  не влияют на  $Z$ -масштабирование.

Из соотношения (1.220) мы видим, что

$$\frac{\partial \psi_p}{\partial r} \Big|_0 \sim \frac{Z^{3/2}}{a_0^{5/2}} \quad (1.224)$$

и, поскольку

$$\psi_s(0) \sim \frac{\sqrt{Z}}{a_0^{3/2}}, \quad (1.225)$$

используя (1.223), мы получаем

$$\langle n'p_{1/2}|H_w|ns_{1/2}\rangle \sim -i \frac{G_F Q_w \hbar}{mca_0} Z^2. \quad (1.226)$$

Слабый заряд  $Q_w$  приблизительно пропорционален атомному номеру, так что

$$\boxed{\langle n'p_{1/2}|H_w|ns_{1/2}\rangle \propto Z^3.} \quad (1.227)$$

Обычно этот результат рассматривают как следствие линейной зависимости от  $Z$  электронной плотности  $s$ -состояний  $|\psi_s(0)|^2$  на ядре (задача 1.12), линейной зависимости от  $Z$  импульса электрона (который входит в  $H_w$ ) вблизи ядра (где отсутствует экранирование) и линейной зависимости  $Q_w$  по  $Z$ . Это объяснение эквивалентно приведенным выше соображениям, если принять во внимание тот факт, что действие оператора импульса на волновую функцию  $p$ -состояния дает

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_p}{\partial r} \Big|_{r=0} \sim Z \frac{\hbar}{a_0} \psi_s(0). \quad (1.228)$$

Тот факт, что индуцированное НСЧ смешивание состояний обратно пропорционально энергетическому зазору между ними (выражение (1.218)), породил идею наблюдения эффектов НСЧ в атомах с почти вырожденными состояниями противоположной четности. Речь шла о  $2s-2p$  системе атома водорода (см. [Hinds (1988)] и ссылки в ней) и о тяжелых элементах, таких, как редкоземельные атомы [Dzuba и др. (1986)], например, самарий [Барков и др. (1989), Wolfenden и Baird (1993)], диспрозий [Budker и др. (1994), Nguyen и др. (1997)] и иттербий [DeMille (1995)].

**(г)** Индуцированное несохранением четности смешивание состояний  $|n'p\rangle$  и  $|ns\rangle$  является чисто мнимым (см. (1.226)), поскольку слабое взаимодействие нарушает инвариантность по отношению к пространственной инверсии, но сохраняет инвариантность по отношению к инверсии времени (Т).

Рассмотрим действие статического электрического поля (вдоль  $z$ ) на атом, находящийся в состоянии  $|ns_{1/2}\rangle$  (см. (1.218)). Гамильтониан, описывающий взаимодействие электрического поля с атомом (в одноэлектронном приближении), имеет вид

$$H_1 = -\vec{d} \cdot \vec{E} = ezE_0, \quad (1.229)$$

где  $\vec{d}$  — оператор электрического дипольного момента, а  $E_0$  — модуль электрического поля  $\vec{E}$ . В первом порядке сдвиг уровня энергии, обусловленный приложенным электрическим полем, дается выражением

$$\Delta E^{(1)} = eE_0 \langle \widetilde{ns}_{1/2} | z | \widetilde{ns}_{1/2} \rangle = \quad (1.230)$$

$$= eE_0 (\langle ns_{1/2} | -i\eta \langle n'p_{1/2} | z | ns_{1/2} \rangle + i\eta \langle n'p_{1/2} | z | ns_{1/2} \rangle), \quad (1.231)$$

где мы неявно полагали, что состояния  $|ns_{1/2}\rangle$  и  $|n'p_{1/2}\rangle$  имеют одинаковые проекции полного углового момента на ось квантования (так что они связываются гамильтонианом  $H_1$  (1.229)) и  $i\eta$  — амплитуда индуцированного НСЧ смешивания состояний (см. (1.218) и (1.226)):

$$i\eta = \frac{\langle n'p_{1/2} | H_w | ns_{1/2} \rangle}{\Delta E}. \quad (1.232)$$

Поскольку  $z$  связывает только состояния противоположной четности, мы имеем

$$\Delta E^{(1)} = eE_0 \langle ns_{1/2} | z | n'p_{1/2} \rangle (-i\eta + i\eta) = 0, \quad (1.233)$$

где мы воспользовались тем фактом, что

$$\langle n'p_{1/2} | z | ns_{1/2} \rangle = \langle ns_{1/2} | z | n'p_{1/2} \rangle. \quad (1.234)$$

Таким образом, линейного штарковского сдвига не наблюдается, поскольку величина  $i\eta$  — чисто мнимая.

Если бы  $i\eta$  содержала действительную часть, сдвиг  $\Delta E^{(1)}$  был бы отличен от нуля, что нарушило бы Т-инвариантность. Чтобы убедиться в этом, мы должны заметить, что если  $\Delta E^{(1)} = -\langle \vec{d} \cdot \vec{E} \rangle \neq 0$ , то  $\langle \vec{d} \rangle \neq 0$ . Теорема Вигнера–Эккарта (Приложение F) утверждает, что любая векторная величина должна быть пропорциональна полному угловому моменту системы, следовательно

$$\langle \vec{d} \rangle \propto \langle \vec{J} \rangle. \quad (1.235)$$

Однако оператор инверсии времени  $T$  преобразует  $\vec{d}$  в  $\vec{d}$ , но  $\vec{J}$  в  $-\vec{J}$ . Поэтому наличие «постоянного» электрического дипольного момента (существующего даже в отсутствие внешнего электрического поля) нарушает Т-инвариантность (более подробное обсуждение см. в задаче 4.8).

(д) Гамильтониан слабого взаимодействия — это скалярный оператор, способный связывать только состояния с одинаковым полным угловым моментом  $J$  и с одинаковыми проекциями углового момента  $M_J$ . Поэтому мы рассмотрим индуцированное НСЧ смешивание состояний с  $M_J = 1/2$ ,

$$i\eta = \frac{\langle 2P_{1/2} M_J = 1/2 | H_w | 2S_{1/2} M_J = 1/2 \rangle}{\Delta E}, \quad (1.236)$$

имея в виду, что из-за вращательной инвариантности состояния с  $M_J = -1/2$  имеют одинаковые амплитуды смешивания.

Для упрощения обозначений, принимая во внимание (1.221), мы можем написать

$$H_w = \beta \vec{s} \cdot \vec{p} \delta^3(\vec{r}), \quad (1.237)$$

где

$$\beta = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \frac{1}{2mc\hbar} Q_w. \quad (1.238)$$

Состояния  $S$  и  $P$  могут быть выражены через произведения спиновых волновых функций ( $|+\rangle$  и  $|-\rangle$ ) и пространственных функций ( $|n, l, m_l\rangle$ ), используя коэффициенты Клебша–Гордона:

$$|2S_{1/2} M_J = 1/2\rangle = |2, 0, 0\rangle|+\rangle, \quad (1.239)$$

$$|2P_{1/2} M_J = 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |2, 1, 1\rangle|-\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |2, 1, 0\rangle|+\rangle. \quad (1.240)$$

Прежде всего, найдем  $\vec{s} \cdot \vec{p} |2P_{1/2} M_J = 1/2\rangle$ . Оператор  $\vec{s} \cdot \vec{p}$ , представленный в спиновом базисе через матрицы Паули, дается выражением

$$\vec{s} \cdot \vec{p} = s_x p_x + s_y p_y + s_z p_z = \quad (1.241)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip_y \\ ip_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_z & 0 \\ 0 & -p_z \end{pmatrix} \right] = \quad (1.242)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}. \quad (1.243)$$

Таким образом, в спиновом базисе получаем

$$\vec{s} \cdot \vec{p} |2P_{1/2} M_J = 1/2\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{3}} |2, 1, 0\rangle \\ \sqrt{\frac{2}{3}} |2, 1, 1\rangle \end{pmatrix}. \quad (1.244)$$

Подставляя это в выражение (1.236), мы имеем

$$i\eta\Delta E = \frac{\hbar\beta}{2} \left( -\sqrt{\frac{1}{3}} \langle 2, 1, 0 | p_z \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle 2, 1, 1 | (p_x + ip_y) \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle \right). \quad (1.245)$$

Заметим, что в этом выражении член  $(\langle 2P_{1/2} M_J = 1/2 | \vec{s} \cdot \vec{p} \rangle)$ , который появляется в формуле для  $\eta$  (1.236), когда используется выражение (1.237) для  $H_w$ , получен из (1.244) путем сопряжения гамильтониана. Теперь примем во внимание тот факт, что в сферической системе координат (см., Приложение F)

$$p_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (p_x + ip_y), \quad (1.246)$$

$$p_0 = p_z, \quad (1.247)$$

$$p_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x - ip_y), \quad (1.248)$$

откуда

$$i\eta\Delta E = -\frac{\hbar\beta}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 2, 1, 0 | p_0 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle + \frac{2}{\sqrt{3}} \langle 2, 1, 1 | p_1 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle \right). \quad (1.249)$$

Теперь мы можем применить теорему Вигнера–Эккарта (Приложение F):

$$\langle 2, 1, 0 | p_0 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 2, 1 | | p \delta^3(\vec{r}) | | 2, 0 \rangle \langle 0, 0, 1, 0 | 1, 0 \rangle, \quad (1.250)$$

$$\langle 2, 1, 1 | p_1 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 2, 1 | | p \delta^3(\vec{r}) | | 2, 0 \rangle \langle 0, 0, 1, 1 | 1, 1 \rangle, \quad (1.251)$$

где  $\langle l_1, m_1, \kappa, q | l_2, m_2 \rangle$  — соответствующий коэффициент Клебша–Гордона, а  $\langle n_2, l_2 | | p \delta^3(\vec{r}) | | n_1, l_1 \rangle$  — приведенный матричный элемент. Оба коэффициента Клебша–Гордона в (1.251) равны единице, следовательно, используя тот факт, что

$$\langle 2, 1, 0 | p_0 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle = \langle 2, 1, 1 | p_1 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle, \quad (1.252)$$

мы получаем в (1.249)

$$\eta\Delta E = -\frac{\hbar\beta\sqrt{3}}{2i} \langle 2, 1, 0 | p_0 \delta^3(\vec{r}) | 2, 0, 0 \rangle. \quad (1.253)$$

Здесь мы используем волновые функции атома водорода, чтобы вычислить интеграл, связанный с упомянутыми матричными элементами. Для начала найдем  $p_0\psi_{210}(\vec{r})$ . Оператор импульса в  $z$ -направлении дается выражением

$$p_0 = p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.254)$$

Чтобы продифференцировать по  $z$  волновые функции атома водорода, которые удобнее всего представляются в сферических координатах, мы должны выразить  $\partial/\partial z$  в сферических координатах<sup>1)</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial\theta}. \quad (1.260)$$

<sup>1)</sup> Градиент в сферических координатах дается выражением

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial\theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \hat{\phi}, \quad (1.255)$$

тогда как в декартовых координатах он имеет вид

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z}. \quad (1.256)$$

Сферический базис связан с декартовым соотношениями

$$\hat{r} = \sin\theta \cos\phi \hat{x} + \sin\theta \sin\phi \hat{y} + \cos\theta \hat{z}, \quad (1.257)$$

$$\hat{\theta} = \cos\theta \cos\phi \hat{x} + \cos\theta \sin\phi \hat{y} - \sin\theta \hat{z}, \quad (1.258)$$

$$\hat{\phi} = -\sin\phi \hat{x} + \cos\phi \hat{y}. \quad (1.259)$$

Используя эти соотношения в (1.255), мы находим для  $z$ -составляющей градиента выражение, представленное в (1.260).

Волновая функция водорода  $\psi_{210}(r, \theta, \phi)$  имеет вид

$$\psi_{210}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta. \quad (1.261)$$

Используя выражения (1.260) и (1.261), находим, что

$$p_0 \psi_{210}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{210}(\vec{r}) = \frac{-i\hbar}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{5/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \cos^2 \theta\right) e^{-r/2a_0}. \quad (1.262)$$

Теперь мы готовы оценить интеграл в выражении (1.253). Замечая, что мы должны взять комплексно-сопряженную величину от (1.262) и используя волновые функции водорода  $\psi_{200}(r, \theta, \phi)$ ,

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad (1.263)$$

мы получаем

$$\eta \Delta E = -\frac{\hbar^2 \beta \sqrt{3}}{32\pi a_0^4} \int \left(1 - \frac{r}{2a_0} \cos^2 \theta\right) \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/a_0} \delta^3(r) d^3r = \quad (1.264)$$

$$= -\frac{\hbar^2 \beta \sqrt{3}}{32\pi a_0^4}. \quad (1.265)$$

Используя выражения (1.238) и (1.210) в (1.265), мы находим

$$\eta \Delta E = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{G_F Q_w}{64\pi} \frac{\hbar}{m c a_0^4} = \quad (1.266)$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{3 \cdot 10^{-12}}{64\pi} Q_w \frac{\hbar c}{a_0^4} \left(\frac{\hbar}{m c}\right)^3 = \quad (1.267)$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{3 \cdot 10^{-12}}{64\pi} Q_w \alpha^4 m c^2. \quad (1.268)$$

Для атома водорода слабый заряд, в соответствии с (1.211), равен

$$Q_w = 1 - 4 \sin^2 \theta_w \approx 0,08. \quad (1.269)$$

Таким образом,

$$\eta \Delta E \approx -2 \cdot 10^{-18} \text{ эВ}. \quad (1.270)$$

Энергетическое расщепление состояний  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  определяется лэмбовским сдвигом

$$\Delta E \approx 1058 \text{ МГц} \approx 4 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}. \quad (1.271)$$

Следовательно, индуцированное НСЧ смешивание состояний  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  в атоме водорода равно

$$\boxed{\eta \approx -5 \cdot 10^{-13}}. \quad (1.272)$$

Заметим, что этот эффект приблизительно на порядок величины больше в дейтерии, где слабый заряд  $Q_w \approx -1$ . Обзор экспериментальных усилий по измерению эффектов НСЧ в водороде сделан в [Hinds (1988)].



(е) Для грубой оценки мы можем воспользоваться тем соображением, что различие между индуцированным НСЧ смешиванием состояний в водороде и смешиванием состояний в цезии определяется лишь различием в значениях  $Z$ ,  $Q$  и расщепления энергетических состояний. В этом приближении амплитуда  $\eta(\text{Cs})$  индуцированного НСЧ смешивания состояний  $6s$  и  $6p$  в цезии соотносится с аналогичной величиной  $\eta(\text{H})$  для состояний  $2s$  и  $2p$  в водороде следующим образом:

$$\eta(\text{Cs}) \sim \eta(\text{H}) \frac{Z^2 Q_w(\text{Cs})}{Q_w(\text{H})} \frac{\Delta E_{\text{H}}(2s, 2p)}{\Delta E_{\text{Cs}}(6s, 6p)}, \quad (1.273)$$

где  $Z = 55$  — атомный номер Cs,  $\Delta E_{\text{H}}(2s, 2p) \approx 4 \cdot 10^{-6}$  эВ — обусловленное лэмбовским сдвигом расщепление между состояниями  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  в атоме водорода и  $\Delta E_{\text{Cs}}(6s, 6p)$  — энергетический зазор между состояниями  $6s$  и  $6p$  в Cs,

$$\Delta E_{\text{Cs}}(6s, 6p) \sim -10^4 \text{ см}^{-1} \sim -1,25 \text{ эВ}. \quad (1.274)$$

Используя (1.211), мы можем оценить величину слабого заряда для Cs,  $Q_w(\text{Cs})$ :

$$Q_w(\text{Cs}) \approx -75, \quad (1.275)$$

что близко к величине  $-72,06(46)$ , полученной экспериментально [Wood и др. (1997)]. Отличие от величины  $-75$  связано с радиационными поправками<sup>1)</sup>. Используя эти значения в (1.273), мы получаем

$$\boxed{\eta(\text{Cs}) \sim -5 \cdot 10^{-12}.} \quad (1.276)$$

Более детальный анализ для Cs приводит к величине вдвое большей<sup>2)</sup> (см., например, [Khriplovich (1991)]).

<sup>1)</sup> Радиационные поправки модифицируют взаимодействие за счет учета процессов более высоких порядков. На языке диаграмм Фейнмана (Приложение Н) эти поправки возникают из диаграмм с одинаковыми начальными и конечными состояниями, но с большим числом промежуточных петель, чем в самом низком порядке теории возмущений (см., например, монографию [Griffiths (1987)]). В частности, в рассматриваемом здесь случае выражение для  $Q_w$  (1.211) подразумевает  $Z_0$ -обмен между ядром и электроном. Одна из фейнмановских диаграмм, описывающих радиационные поправки  $Q_w$ , включает распространение  $Z_0$  от ядра, превращаясь затем в тор-кварк и анти-тор-кварк, которые затем аннигилируют с образованием  $Z_0$ , который взаимодействует с электроном.

<sup>2)</sup> Можно заметить, что, поскольку все  $p$ -состояния атома Cs находятся достаточно далеко по энергии от состояния  $6s$ , корректный расчет эффектов НСЧ должен включать сумму по всем  $p$ -состояниям. Однако амплитуды связи с состояниями, отличными от  $6p$  и  $7p$ , оказываются малыми, и можно получить вполне разумные по точности предсказания для индуцированного НСЧ смешивания, учитывая только примешивание  $6p$  и  $7p$  состояний к состоянию  $6s$ . Индуцированное НСЧ смешивание состояний  $6s$  и  $7p$  приблизительно в 4 раза слабее, чем смешивание  $5s$ – $6p$ . Поэтому наша оценка должна дать близкий к истине результат для полного смешивания  $p$ -состояний с состояниями  $6s$ .

При столь малой амплитуде смешивания измерение эффекта НСЧ в цезии с точностью до долей процента [Wood и др. (1997)] было действительно выдающимся достижением.

### 1.14. Несохранение четности в антиатомах

Как говорилось в задаче 1.13, несохранение четности, связанное со слабым нейтральным взаимодействием, способно проявляться в атомных переходах. Например для сильно запрещенного однофотонного распада неполяризованного возбужденного водорода

$$|2S\rangle \rightarrow |1S\rangle + \gamma \quad (1.277)$$

излучаемые фотоны имеют преимущественно циркулярную поляризацию. Этот эффект имеет большую величину для дейтерия из-за большей величины его слабого заряда  $Q_w$  (выражение (1.211)). Для дейтерия степень циркулярной поляризации фотонов составляет  $\sim 10^{-4}$ .

Оказывается, что в то время как Р-инвариантность нарушается, симметрия практически полностью восстанавливается при комбинированном преобразовании пространственной инверсии и сопряжения заряда <sup>1)</sup> С. До сих пор единственный пример нарушения СР-симметрии был обнаружен в распаде нейтральных К- и В-мезонов, и, в рамках этой задачи, мы будем предполагать, что СР является хорошей симметрией.

Задаем вопрос: если водород преимущественно испускает право-поляризованные (R) фотоны <sup>2)</sup>, каков знак преимущественной циркулярной поляризации для *антиводорода*?

Антиводород был получен в CERN [G. Baug и др. (1996)] и в лаборатории Ферми [G. Blanford и др. (1998)] с помощью ускорителей частиц. Антиводород, полученный в этих экспериментах, двигался почти со световой скоростью по отношению к лабораторной системе координат, что крайне затрудняло прецизионные спектроскопические измерения. Антипротоны с низкой энергией и холодные позитроны могут одновременно запастись в ловушках Пеннинга [Gabrielse и др. (1999)]. Этот метод недавно был успешно использован для получения холодного антиводорода [Amoretti и др. (2002), Gabrielse и др. (2002)]. Это перспективный путь получения антиводорода, пригодного для спектроскопических экспериментов. Антиводород может служить интересной системой для проверки СРТ и лоренцевой инвариантности (см., например, [Holscheiter и Charlton (1999)] и [Gabrielse (2001)]).

### Решение

Рассмотрим распад (1.277) как он наблюдается в лаборатории и его зеркальное отображение (верхняя часть рис. 1.11). Зеркальное отражение преобразует R-фотоны в L-фотоны (L и R обозначают, соответственно, левую и правую поляризацию),

<sup>1)</sup> Такое преобразование превращает материю в антиматерию.

<sup>2)</sup> В этой книге мы используем спектроскопическое соглашение о право- и левоциркулярно поляризованном свете (т.е. с правой и левой круговой поляризацией), согласно которому  $\sigma_+$  фотон (фотон с положительной спиральностью, со спином фотона, направленным по направлению распространения) называют левоциркулярно поляризованным, а  $\sigma_-$  фотон — правоциркулярно поляризованным фотоном).

так что, глядя в зеркало, мы видим, что возбужденный водород преимущественно излучает L-фотоны. В действительности такого *не происходит*, в чем состоит суть несохранения четности: законы природы не идентичны в реальной лаборатории и в ее зеркальном отражении. (В данном случае закон природы утверждает, что возбужденный водород преимущественно распадается в R-фотоны.)

Теперь вместо обычного (P) зеркала, инвертирующего пространственные координаты <sup>1)</sup>, рассмотрим его C-аналог. «C-зеркало» инвертирует все заряды и превращает все частицы в античастицы, но не влияет на координаты. Глядя на наш процесс в такое зеркало (средняя часть рис. 1.11), мы видим антиводород, который при распаде преимущественно испускает R-фотон. Такой процесс, опять же, в реальности не происходит (нарушение C-симметрии).

$$\begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{l} \text{H}(2S) \rightarrow \text{H}(1S) + \gamma(R) \end{array} \right| \begin{array}{l} \text{H}(2S) \rightarrow \text{H}(1S) + \gamma(L) \\ \text{P} \end{array} \\
 \\
 \left. \begin{array}{l} \text{H}(2S) \rightarrow \text{H}(1S) + \gamma(R) \end{array} \right| \begin{array}{l} \bar{\text{H}}(2S) \rightarrow \bar{\text{H}}(1S) + \gamma(R) \\ \text{C} \end{array} \\
 \\
 \left. \begin{array}{l} \text{H}(2S) \rightarrow \text{H}(1S) + \gamma(R) \end{array} \right| \begin{array}{l} \bar{\text{H}}(2S) \rightarrow \bar{\text{H}}(1S) + \gamma(L) \\ \text{CP} \end{array}
 \end{array}$$

Рис. 1.11. Распад водорода  $|2S\rangle \rightarrow |1S\rangle + \gamma$ , наблюдаемый в лаборатории, а также в условиях воздействия различных преобразований: P-, C- и комбинированное CP-преобразование.  $\bar{\text{H}}$  обозначает антиводород,  $\gamma(L)$  и  $\gamma(R)$  обозначают фотоны и их преимущественные циркулярные поляризации

Чтобы определить, как в действительности релаксирует антиводород, мы можем воспользоваться CP-инвариантностью и посмотреть на исходный процесс через CP-зеркало (нижняя часть рис. 1.11). Из-за CP-инвариантности то, что мы видим в CP-зеркале, соответствует реальному процессу, который, по крайней мере в принципе, может быть воспроизведен в лаборатории. Мы можем заключить, что антиводород преимущественно релаксирует с испусканием L-фотона, и степень циркулярной поляризации такая же, как и у водорода.

Тот же результат может быть получен более формализованным образом. Рассмотрим сначала водород. Его гамильтониан может быть записан в виде

$$H = H_0 + H_w, \quad (1.278)$$

где  $H_0$  — часть гамильтониана, сохраняющая четность, а  $H_w$  — часть гамильтониана, не сохраняющая четность. Как мы видели в задаче 1.13, часть гамильтониана, не

<sup>1)</sup> В действительности зеркало инвертирует только одну из трех координат, но это не существенно, поскольку инверсия всех трех осей координат эквивалентна инверсии только одной из них с последующим вращением на  $180^\circ$  вокруг инвертированной оси.

сохраняющая четность, приводит к смешиванию собственных состояний  $H_0$ , которые обладают определенной четностью. В частности, собственное состояние полного гамильтониана теперь имеет вид

$$|\widetilde{2S}\rangle \approx |2S\rangle + \frac{\langle 2P|H_w|2S\rangle}{E_{2S} - E_{2P}}|2P\rangle \equiv |2S\rangle + i\eta|2P\rangle. \quad (1.279)$$

Мы здесь использовали первый порядок теории возмущений,  $E_{2S}$  и  $E_{2P}$  — энергии соответствующих собственных состояний  $H_0$ , и мы пренебрегли смешиванием состояния  $|2S\rangle$  со всеми состояниями, кроме ближайшего состояния  $|2P\rangle$ . Как мы видели в задаче 1.13, постоянная  $i\eta$ , вследствие Т-инвариантности, оказывается чисто мнимой. Форма уравнения (1.279) соответствует так называемой «спиновой спирали», знак которой определяет преимущественную циркулярность испускаемого фотона (см. [Khriplovich (1992)], в частности, гл. 2).

Теперь проанализируем антиводород. В квантовой теории поля антиводород автоматически включается в гамильтониан, поэтому, обобщая (1.278), мы можем написать

$$H = H_0 + H_w + \overline{H}_0 + \overline{H}_w, \quad (1.280)$$

т.е. мы явно включаем для антиводорода члены, сохраняющие и не сохраняющие четность (чертой помечены величины, относящиеся к антиводороду). СР-инвариантность означает, что полный гамильтониан (1.280) инвариантен по отношению к преобразованию СР, поэтому

$$(CP)H_0(CP)^{-1} = \overline{H}_0; \quad (CP)H_w(CP)^{-1} = \overline{H}_w. \quad (1.281)$$

Аналог выражения (1.279) для антиводорода имеет вид

$$|\widetilde{2\overline{S}}\rangle \approx |\overline{2S}\rangle + i\overline{\eta}|\overline{2P}\rangle. \quad (1.282)$$

Чтобы оценить  $i\overline{\eta}$  следует начать с определения  $i\eta$  и вставить тождество  $(CP)^{-1}(CP) = 1$  в обе части оператора  $H_w$ :

$$i\eta = \frac{\langle 2P|H_w|2S\rangle}{E_{2S} - E_{2P}} = \frac{\langle 2P|(CP)^{-1}(CP)H_w(CP)^{-1}(CP)|2S\rangle}{E_{2S} - E_{2P}} = \quad (1.283)$$

$$= \frac{\langle -\overline{2P}|(CP)H_w(CP)^{-1}|\overline{2S}\rangle}{E_{2S} - E_{2P}} = \quad (1.284)$$

$$= -\frac{\langle \overline{2P}|\overline{H}_w|\overline{2S}\rangle}{E_{\overline{2S}} - E_{\overline{2P}}} = -\overline{\delta}. \quad (1.285)$$

Здесь мы воспользовались свойствами волновых функций  $CP|2S\rangle = |\overline{2S}\rangle$ ,  $CP|2P\rangle = -|\overline{2P}\rangle$  (С просто добавляет верхнюю черту, а Р меняет знак волновых функций с отрицательной четностью) и инвариантностью собственных энергий  $H_0 + \overline{H}_0$  по отношению к операции СР. Отсюда видно, что знак нарушающего четность смешивания для антиводорода противоположен этому знаку для водорода, что означает преимущественное испускание L-фотонов, в соответствии с нашими более ранними заключениями.

### 1.15. Анапольный момент

*Анаполь* [Zel'dovich (1958)] — это электромагнитный момент<sup>1)</sup>, который наряду с более знакомыми моментами, такими как магнитный диполь, появляется в мультипольном разложении вектор-потенциала распределения тока конечной протяженности в пространстве, например, в пределах атомного ядра.

Анапольный момент  $\vec{a}$  системы определяется следующим образом:

$$\vec{a} = -\pi \int r^2 \vec{j}(\vec{r}) d^3r, \quad (1.286)$$

где  $\vec{j}(\vec{r})$  — плотность тока. Из этого определения, как мы покажем в этой задаче, следует, что вклад анаполя в векторный потенциал имеет вид

$$\vec{A}_a(\vec{R}) = \vec{a} \delta(\vec{R}), \quad (1.287)$$

что указывает на то, что для того чтобы заряженная частица «чувствовала» анапольный момент, она должна оказаться внутри этого распределения токов (*контактное взаимодействие*).

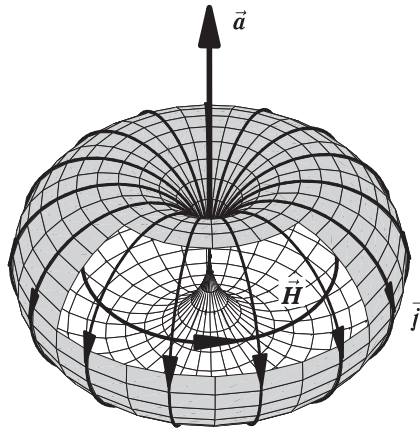


Рис. 1.12. Простейшая система с исчезающим «неприводимым» анапольным моментом: тороидальная обмотка, которую можно представить себе как последовательность петель тока, смещенных относительно начала координат. Рисунок предоставлен S. M. Rochester

Чтобы представить себе наглядно простейшую систему, обладающую анапольным моментом, рассмотрим сначала петлю с током, смещенную относительно начала координат [Flambaum и Muiray (1997)]. Как следует из определения (1.286), существует ненулевой анапольный момент, направленный противоположно току в точке, максимально удаленной от начала координат. Прямым обобщением этого является тороидальная обмотка (рис. 1.12), в которой ток последовательно протекает через ряд таких петель. Заметим, что в этом случае, в отличие от случая одного лепестка, магнитное поле, создаваемое током, ограничено внутренней частью тора. Кроме того,

<sup>1)</sup> Различные электромагнитные моменты соответствуют тензорам разных рангов, необходимым для описания зарядов и токов.

величина анапольного момента не зависит от выбора начала системы координат. Эта ситуация аналогична случаю одиночного заряда, смещенного относительно начала координат, и диполю, образуемому двумя противоположными зарядами. Можно сказать, что тороидальный ток — это простейший пример «неприводимого» анаполя.

Обратимся теперь к задаче.

**(а)** Объяснить, почему только ядра с ненулевым спином могут обладать анапольным моментом и почему анаполь может возникать только благодаря взаимодействиям, нарушающим четность <sup>1)</sup>.

### Решение

Очевидно, что для любой характеристики системы (в данном случае — атомного ядра), описываемой тензором первого ранга (вектором), анапольный момент должен быть пропорциональным полному угловому моменту системы  $\vec{I}$  (см. Приложение F). Природа анапольного момента, связанная с эффектами нарушения четности, становится ясной при рассмотрении поведения векторов  $\vec{a}$  и  $\vec{I}$  при пространственной инверсии: тогда как второй из них — псевдовектор, первый — это обычный вектор, подобный  $\vec{j}$  (см. выражение (1.286)). Заметим, однако, что существование анапольного момента не нарушает время-инвариантности, поскольку оба вектора  $\vec{a}$  и  $\vec{I}$  нечетны по отношению к T-преобразованию.

**(б)** Обратимся теперь к выводу выражения (1.287), который может быть сделан аналогично выводу формул для «обычных» моментов (магнитного диполя и т. д.), см., например, [Jackson (1975)] или [Landau и Lifshitz (1987)].

Этот пункт задачи требует применения довольно изощренного математического аппарата (тензорной алгебры).

В приведенном здесь выводе мы будем следовать [Сушков и др. (1984)] и [Khriplovich (1989, 1991)]. Начнем с общего выражения для векторного потенциала

$$\vec{A}(\vec{R}) = \frac{1}{c} \int \frac{\vec{j}(\vec{r})}{|\vec{R} - \vec{r}|} d^3r \quad (1.288)$$

и разложим подынтегральное выражение по степеням  $r/R$  (принимая, что  $R \gg r$ ) <sup>2)</sup>.

Рассмотреть член нулевого порядка в разложении векторного потенциала (1.288). Показать, что он зануляется для атомного ядра.

### Решение

Здесь удобно воспользоваться векторной формой разложения Тейлора:

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} = \frac{1}{R} - \left( \nabla_k \frac{1}{R} \right) r_k + \frac{1}{2} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) r_k r_l + \dots, \quad (1.289)$$

где, в соответствии с общепринятым соглашением, подразумевается суммирование по повторяющимся индексам.

<sup>1)</sup> Ядерный анапольный момент, возникающий вследствие слабого взаимодействия (задача 1.13), был открыт в эксперименте по НСЧ в атоме Cs [Wood и др. (1997)].

<sup>2)</sup> Добросовестный читатель может поставить под вопрос справедливость такого подхода, поскольку мы начинаем с разложения векторного потенциала в пределе  $R \gg r$  и заканчиваем  $\delta$ -функцией (формула (1.287)). Тем не менее, более строгий вывод [Flambaum и Khriplovich (1980), Flambaum и Handhart (1993)] подтверждает сделанное выше заключение.

Таким образом, член нулевого порядка в разложении векторного потенциала (1.288) имеет вид

$$\vec{A}^{(0)}(\vec{R}) = \frac{1}{cR} \int \vec{j}(\vec{r}) d^3r. \quad (1.290)$$

Эта величина зануляется для атомного ядра, поскольку в нем не может быть никакого среднего тока для системы конечного размера в стационарном состоянии (для которого пространственное распределение заряда не меняется во времени).

**(в)** Рассмотреть член второго порядка в разложении векторного потенциала. Показать, что он соответствует потенциалу магнитного диполя.

### Решение

Подынтегральное выражение в члене первого порядка для каждой декартовой компоненты векторного потенциала может быть разложено на симметричную и антисимметричную части:

$$A_i^{(1)}(\vec{R}) = -\frac{1}{c} \left( \nabla_k \frac{1}{R} \right) \int j_i r_k d^3r - \frac{1}{c} \left( \nabla_k \frac{1}{R} \right) \int \left[ \frac{1}{2} (j_i r_k + j_k r_i) + \frac{1}{2} (j_i r_k - j_k r_i) \right] d^3r. \quad (1.291)$$

Чтобы показать, что интеграл с симметричной комбинацией в (1.291) обращается в ноль, используем общепринятый прием с привлечением теоремы Гаусса, которая утверждает, что объемный интеграл пространственной производной произвольной «хорошей» функции  $f$  равен интегралу по поверхности самой функции,

$$\int \nabla_m f d^3r = \int f dS_m. \quad (1.292)$$

Действительно, рассмотрим интеграл

$$\int \nabla_m (r_i r_k j_m) d^3r. \quad (1.293)$$

Выражая интеграл по объему через интеграл по поверхности в соответствии с (1.292) и выбирая поверхность интегрирования за пределами границ системы (где ток равен нулю), мы видим, что интеграл (1.293) обращается в ноль. С другой стороны, мы также имеем

$$0 = \int \nabla_m (r_i r_k j_m) d^3r = \int (\delta_{mi} r_k j_m + r_i \delta_{mk} j_m + r_i r_k \vec{\nabla} \cdot \vec{j}) d^3r. \quad (1.294)$$

Последний член в подынтегральном выражении (1.294) зануляется, потому что дивергенция тока в стационарном состоянии равна нулю. Два других члена соответствуют симметричной комбинации в (1.291).

Рассмотрим теперь антисимметричную часть интеграла в (1.291)

$$A_i^{(1)}(\vec{R}) = \frac{1}{c} \frac{R_k}{R^3} \int \left\{ \frac{1}{2} (j_i r_k - j_k r_i) \right\} d^3r. \quad (1.295)$$

Поскольку

$$R_k j_i r_k - R_k j_k r_i = j_i \vec{R} \cdot \vec{r} - r_i \vec{R} \cdot \vec{j} = \{ \vec{R} \times (\vec{j} \times \vec{r}) \}_i, \quad (1.296)$$

мы узнаем в (1.295) знакомое выражение для векторного потенциала магнитного диполя  $\vec{m}$

$$A_i^{(1)}(\vec{R}) = \frac{\vec{m} \times \vec{R}}{R^3}, \quad (1.297)$$

где магнитный дипольный момент определяется как

$$\vec{m} = \frac{1}{2c} \int \vec{r} \times \vec{j}(\vec{r}) d^3 r. \quad (1.298)$$

(г) Обратимся, наконец, к членам второго порядка мультипольного разложения векторного потенциала (1.288), которые дают нам анапольный момент

$$\vec{A}_i^{(2)}(\vec{R}) = \frac{1}{2c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int j_i r_k r_l d^3 r. \quad (1.299)$$

Показать, что все симметричные члены в (1.299) обращаются в ноль.

### Решение

Подынтегральное выражение в (1.299) — это тензор третьего ранга (т. е., тензор, возникающий из комбинации трех векторов), который обычно можно разложить на неприводимые тензоры рангов 3, 2, 1 и 0, первый из которых является симметричным по отношению к компонентам составляющих векторов, а последний — полностью антисимметричным<sup>1)</sup>. Теперь мы воспользуемся приемом, аналогичным использованному в (1.294), чтобы показать, что симметричная часть тензора после интегрирования обращается в ноль:

$$\begin{aligned} 0 &= \int \nabla_m (r_i r_k r_l j_m) d^3 r = \int (\delta_{mi} r_k r_l j_m + r_i \delta_{mk} r_l j_m + r_i r_k \delta_{ml} j_m) d^3 r = \\ &= \int (r_k r_l j_i + r_i r_l j_k + r_i r_k j_l) d^3 r. \end{aligned} \quad (1.300)$$

Остальные части тензора в подынтегральном выражении (1.299) являются антисимметричными тензорами второго и первого ранга (т. е. в последнем случае векторами)<sup>2)</sup>.

(д) Показать, что антисимметричная часть второго ранга члена второго порядка разложения векторного потенциала нарушает Т-инвариантность.

<sup>1)</sup> Чтобы увидеть, что неприводимый тензор третьего ранга является симметричным, можно рассматривать каждый из составляющих векторов (с тремя независимыми координатами) как объект со спином 1, а неприводимый тензор третьего ранга как объект со спином 3. Понятно, что для того чтобы получить спин 3 путем комбинации трех единичных спинов необходимо построить полностью симметричную волновую функцию. Для нулевого ранга единственный скаляр, который может быть построен из трех векторов  $\vec{v}_{1-3}$ , дается их смешанным произведением  $\vec{v}_1 \cdot (\vec{v}_2 \times \vec{v}_3) = (v_1)_i (v_2)_j (v_3)_k \epsilon_{ijk}$ , где  $\epsilon_{ijk}$  — полностью антисимметричный тензор Леви-Чивита. Когда два из составляющих векторов одинаковы, члены нулевого порядка обращаются в ноль.

<sup>2)</sup> Тензор третьего ранга общего вида (27 независимых элементов) разлагается на один неприводимый тензор третьего ранга (7 элементов), два неприводимых тензора второго ранга ( $2 \times 5$  элементов), три вектора ( $3 \times 3$  элемента) и скаляр (один элемент; см., например, [Varshalovich (1988), гл. 3.2.2]); однако, в данном случае число возможных тензоров уменьшается, поскольку два составляющих вектора одинаковы, и возможны только структуры, симметричные по соответствующим элементам.



### Решение

Заметим, что все оставшиеся части тензора в подынтегральном выражении (1.299) меняют знак как при пространственной инверсии (преобразующей  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$  и  $\vec{j} \rightarrow -\vec{j}$ ), так и при инверсии времени (осуществляющей преобразование  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}$  и  $\vec{j} \rightarrow -\vec{j}$ ). По теореме Вигнера–Экарта (Приложение F), любой тензор второго ранга, характеризующий систему (в данном случае — ядро) с полным угловым моментом  $I$ , должен быть пропорционален единственному неприводимому тензору второго ранга, который может быть построен из компонент  $\vec{I}$ :

$$\frac{1}{2}(I_i I_k + I_k I_i) - \frac{1}{3} I(I+1) \delta_{ik}, \quad (1.301)$$

который является четным как по отношению к пространственной инверсии, так и по отношению к обращению времени. Следовательно, существование момента второго ранга (называемого *магнитным квадрупольным моментом*) нарушило бы инвариантности как по четности (P) так и по обращению времени (T). В этой задаче мы ограничимся рассмотрением только T-инвариантных моментов и не будем в дальнейшем рассматривать магнитный квадруполь.

(е) Показать, что оставшийся тензор первого ранга во втором порядке разложения векторного потенциала есть вектор, пропорциональный  $r^2 \vec{j}$ .

### Решение

Рассмотрим векторы, которые могут быть построены из  $r_i r_k j_l$ . Единственные возможности это  $r^2 \vec{j}$  и  $\vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{j})$ . Оказывается, что интегралы по этим двум векторам не являются независимыми. Это видно из того, что в выражении (1.300) отсутствует суммирование по этим индексам, и приведенное тождество справедливо для любого набора компонент. А если так, то же самое справедливо для сумм этих компонент. В частности, сумма (называемая *сверткой тензоров по двум индексам*) дает

$$0 = \delta_{kl} \int (r_k r_l j_i + r_i r_l j_k + r_i r_k j_l) d^3 r = \int (r^2 j_i + 2r_i(\vec{r} \cdot \vec{j})) d^3 r. \quad (1.302)$$

Таким образом, достаточно рассмотреть только структуру  $r^2 \vec{j}$ .

(ж) Используя полученные результаты, доказать, что член второго порядка в выражении для векторного потенциала дается формулой

$$\vec{A}_i^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{3c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int \epsilon_{kip} V_p r_l d^3 r, \quad (1.303)$$

где  $V_p$  — *дуальный вектор* для антисимметричного тензора второго порядка  $j_k r_i - j_i r_k$  (см., например, [Arfken (1985), гл. 3.4]):

$$(j_k r_i - j_i r_k) = \epsilon_{kip} V_p. \quad (1.304)$$

Такая форма явно учитывает антисимметрию. Явное выражение компонент  $\vec{V}$  находится путем свертки обеих сторон равенства (1.304) с  $\epsilon_{kij}$  и принимая во внимание, что

$$\epsilon_{kip} \epsilon_{kij} = 2\delta_{pq}, \quad (1.305)$$

$$V_q = \frac{1}{2} \epsilon_{kij} (j_k r_i - j_i r_k). \quad (1.306)$$

### Решение

Вернемся к выражению (1.299) и преобразуем его с учетом (1.300) и того факта, что тензор  $\nabla_k \nabla_l / R$  симметричен по индексам  $l$  и  $k$ . Во-первых, из выражения (1.300) мы имеем

$$\int j_i r_k r_l d^3 r = - \int (j_k r_i r_l + j_l r_i r_k) d^3 r. \quad (1.307)$$

Подставляя этот результат в (1.299), получаем

$$\vec{A}_i^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{2c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int (j_k r_i r_l + j_l r_i r_k) d^3 r = -\frac{1}{c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int j_k r_i r_l d^3 r, \quad (1.308)$$

где в последнем выражении использована симметрия  $\nabla_k \nabla_l / R$ . Можно скомбинировать выражения (1.299) и (1.308) (путем добавления полусуммы выражений (1.299) и (1.308)), чтобы получить комбинацию в подинтегральном выражении, антисимметричную по индексам  $l$  и  $k$ :

$$\frac{3}{2} \vec{A}_i^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{2c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int (j_k r_i - j_l r_k) r_l d^3 r. \quad (1.309)$$

Подставляя (1.304) в (1.309), получаем желаемый результат:

$$\vec{A}_i^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{3c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int \epsilon_{kip} V_p r_l d^3 r. \quad (1.310)$$

**(3)** Член  $\vec{A}_i^{(2)}(\vec{R})$  соответствует векторному потенциалу, связанному с анапольным моментом. Используя выражение (1.310), доказать соотношение (1.287)

### Решение

Для того чтобы завершить разложение подинтегрального выражения на неприводимые структуры, мы можем представить тензор  $V_p r_l$  в виде суммы симметричной и антисимметричной частей. Симметричная часть — это тензор второго ранга, соответствующий магнитному квадрупольному моменту. Как мы видели выше, этот момент нарушает время-инверсионную симметрию, и мы не будем рассматривать его в данной задаче. Обратимся теперь к антисимметричной части  $V_p r_l$ , которую мы запишем, по аналогии с выражением (1.304), в виде

$$\frac{1}{2} (V_p r_l - V_l r_p) = \frac{1}{2} \epsilon_{plq} W_q. \quad (1.311)$$

Подставляя (1.311) в (1.310) и используя тождество

$$\epsilon_{kip} \epsilon_{plq} = \delta_{kl} \delta_{iq} - \delta_{kq} \delta_{il}, \quad (1.312)$$

мы можем записать:

$$\vec{A}_{i, \text{Anapole}}^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{6c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \int (\delta_{kl} W_i - \delta_{il} W_k) d^3 r. \quad (1.313)$$

Мы привели выражение для векторного потенциала к виду, зависящему только от одной векторной характеристики системы, — интеграла от  $\vec{W}$ . Ясно, что эта величина должна быть пропорциональна анапольному моменту (1.286). Чтобы получить это

в явном виде, мы используем выражение (1.306) и его аналог для компонент  $\vec{W}$  и напомним

$$\begin{aligned} \int W_i d^3r &= \frac{1}{2} \epsilon_{pli} \int (V_p r_l - V_l r_p) d^3r = \\ &= \frac{1}{4} \epsilon_{pli} \int [\epsilon_{kqp} (j_k r_q - j_q r_k) r_l - \epsilon_{kql} (j_k r_q - j_q r_k) r_p] d^3r = \int [-j_i r^2 + r_i (\vec{j} \cdot \vec{r})] d^3r, \end{aligned} \quad (1.314)$$

где мы опять использовали тождество (1.312). Выражение (1.314) можно упростить с помощью соотношения (1.302):

$$\int W_i d^3r = -\frac{3}{2} \int j_i r^2 d^3r = \frac{3}{2\pi} a_i, \quad (1.315)$$

где в последнем равенстве мы воспользовались определением (1.286).

Теперь мы готовы подставить результат (1.315) в выражение для векторного потенциала (1.313):

$$\vec{A}_{i, \text{Anapole}}^{(2)}(\vec{R}) = -\frac{1}{4\pi c} \left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) (\delta_{kl} a_i - \delta_{il} a_k). \quad (1.316)$$

Первый член в (1.316) содержит

$$\nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \delta_{kl} = \nabla^2 \frac{1}{R} = -4\pi \delta(\vec{R}). \quad (1.317)$$

Последнее равенство — это уравнение Лапласа для скалярного потенциала точечного заряда. Обсудим теперь второй член выражения (1.316). Он пропорционален величине

$$\left( \nabla_k \nabla_l \frac{1}{R} \right) \delta_{il} a_k = \nabla_i \left( \vec{a} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{R} \right), \quad (1.318)$$

т.е. градиенту скалярной функции. Напомним, однако, что векторный потенциал не однозначен: он определен с точностью до градиента произвольной скалярной функции; добавление такой функции называют *преобразованием калибровки* (см., например, [Landau и Lifshitz (1987)])<sup>1)</sup>. Мы фактически записали наше исходное выражение (1.288) в *кулоновской калибровке*, для которой  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ .

Опуская второй член в (1.316), поскольку он может быть исключен с помощью калибровочного преобразования, и используя выражение (1.317), мы получаем искомого выражение (1.287).

<sup>1)</sup> Это происходит потому, что наблюдаемые — это поля, а не потенциалы. Чтобы найти магнитное поле, мы возьмем ротор  $\vec{A}$ . Поскольку ротор градиента равен нулю, поле инвариантно по отношению к калибровочному преобразованию.

## Глава 2

# АТОМЫ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

### 2.1. Электрическая поляризуемость основного состояния водорода

Это классическая задача, касающаяся атома водорода в основном состоянии, помещенного в однородное электрическое поле  $\vec{\mathcal{E}}$ . С точностью до второго порядка по полю, сдвиг энергии основного состояния дается формулой

$$\Delta E_1 = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2, \quad (2.1)$$

где  $\alpha$  — *поляризуемость*.

Оценить поляризуемость  $\alpha$  для основного состояния водорода. Для целей такой оценки можно пренебречь тонким (задача 1.3) и сверхтонким (задача 1.4) взаимодействиями, т. е. пренебречь эффектами, связанными со спином электрона. Сопоставить этот результат с поляризуемостью классической проводящей сферы с радиусом  $a_0$ .

Измерения электрической поляризуемости широко применялись для выяснения атомной и молекулярной структуры, поскольку поляризуемость является чувствительным зондом электронной волновой функции вдали от ядра.

#### Подсказка

Для оценки поляризуемости мы можем принять, что  $E_1^{(0)} - E_n^{(0)} \approx E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$ , где  $E_i^{(0)}$  — невозмущенные энергии атома водорода.

#### Решение

Гамильтониан, описывающий эту систему, имеет вид

$$H = H_0 + H_1, \quad (2.2)$$

где

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (2.3)$$

это гамильтониан свободного атома водорода, а  $H_1$  — гамильтониан, возмущенный присутствием внешнего электрического поля. Направляя ось квантования ( $z$ ) вдоль электрического поля, имеем

$$H_1 = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r \cos \theta. \quad (2.4)$$

Поскольку  $H_1$  связывает только состояния противоположной четности, в первом приближении сдвиг  $\Delta E_1^{(1)}$  отсутствует:

$$\Delta E_1^{(1)} = \langle 1, 0, 0 | H_1 | 1, 0, 0 \rangle = 0, \quad (2.5)$$

где  $|n, l, m\rangle$  обозначают невозмущенное состояние с главным квантовым числом  $n$ , квантовым числом орбитального углового момента  $l$  и проекцией орбитального углового момента на  $z$ -ось  $m\hbar$ . Следовательно, мы можем использовать теорию возмущений второго порядка, когда энергетический сдвиг дается выражением <sup>1)</sup>

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_{n,l,m} \frac{|\langle n, l, m | H_1 | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (2.6)$$

Теперь, пользуясь соотношениями (2.1) и (2.6), мы можем найти поляризуемость  $\alpha$  из равенства

$$-\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 = \sum_{n,l,m} \frac{|\langle n, l, m | H_1 | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (2.7)$$

Используя приближение, предложенное в подсказке, а именно:  $E_1^{(0)} - E_n^{(0)} \approx E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$  мы имеем

$$\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 \approx \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \sum_{n,l,m} |\langle n, l, m | H_1 | 1, 0, 0 \rangle|^2. \quad (2.8)$$

Рассмотрим теперь сумму

$$\begin{aligned} \sum_{n,l,m} |\langle n, l, m | H_1 | 1, 0, 0 \rangle|^2 &= \langle 1, 0, 0 | H_1 \left( \sum_{n,l,m} |n, l, m\rangle \langle n, l, m| \right) H_1 | 1, 0, 0 \rangle = \\ &= \langle 1, 0, 0 | H_1^2 | 1, 0, 0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где мы воспользовались соотношением полноты

$$\sum_{n,l,m} |n, l, m\rangle \langle n, l, m| = 1. \quad (2.10)$$

Из (2.8) и (2.9) получаем

$$\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 \approx \frac{\langle 1, 0, 0 | H_1^2 | 1, 0, 0 \rangle}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}. \quad (2.11)$$

Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}, \quad (2.12)$$

<sup>1)</sup> Хотя правила отбора в электрическом дипольном приближении для поля, ориентированного вдоль оси  $z$ , ( $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta m = 0$ ), подразумевают, что большое число членов в сумме (2.6) обращаются в ноль, мы сохраним их, чтобы в дальнейших расчетах использовать в явном виде соотношение полноты (2.10).

и матричный элемент в (2.11) дается интегралом

$$\langle 1, 0, 0 | H_1^2 | 1, 0, 0 \rangle = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^4 e^{-2r/a_0} dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = e^2 \mathcal{E}^2 a_0^2. \quad (2.13)$$

Разность энергий основного и первого возбужденного состояний атома водорода

$$E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{1}{4} - 1 \right) = \frac{3e^2}{8a_0}. \quad (2.14)$$

Пользуясь выражениями (2.13) и (2.14) в формуле (2.11), мы получаем оценку для поляризуемости основного состояния атома водорода

$$\alpha \approx \frac{16}{3} a_0^3 \approx 0,79 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3. \quad (2.15)$$

Принимая во внимание приближение, сделанное в (2.8), это, по сути дела, верхний предел поляризуемости основного состояния водорода. Эта величина оказывается близкой к точному значению (см., например, [Bethe и Salpeter (1977)])

$$\alpha = \frac{9}{2} a_0^3 \approx 0,67 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3. \quad (2.16)$$

Интересно также сопоставить  $\alpha$  с поляризуемостью классической проводящей сферы радиуса  $a_0$ . Электрический дипольный момент  $\vec{d}$  сферы связан с величиной приложенного электрического поля  $\vec{\mathcal{E}}$  через поляризуемость <sup>1)</sup>

$$\vec{d} = \alpha \vec{\mathcal{E}}. \quad (2.17)$$

Электроны на сфере располагаются так, что электрическое поле оказывается направленным по нормали к поверхности (иначе возникнет тангенциальная сила, действующая на свободные заряды проводящей среды). Снаружи от сферы мы можем принять, что поле, создаваемое проводником, является полем диполя <sup>2)</sup>. Электрическое поле  $\vec{\mathcal{E}}_d$ , создаваемое диполем  $\vec{d}$ , дается выражением

$$\vec{\mathcal{E}}_d = \frac{1}{r^3} [3(\vec{d} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{d}]. \quad (2.18)$$

<sup>1)</sup> Связь между (2.17) и (2.1) следует из соотношения

$$E = - \int_0^{\mathcal{E}} \vec{d} \cdot d\vec{\mathcal{E}}' = - \int_0^{\mathcal{E}} \alpha \mathcal{E}' d\mathcal{E}' = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2.$$

<sup>2)</sup> Об этом можно догадаться по высокой симметрии конфигурации: проводник сферически симметричен, и электрическое поле характеризуется только одним направлением. Такая догадка действительно соответствует уравнению Пуассона, поэтому, в силу единственности, это должно быть верным решением (см., например, [Jackson (1975)]).

На поверхности сферы ( $r = a_0$ ) компонента  $\vec{\mathcal{E}} + \vec{\mathcal{E}}_d$ , не направленная вдоль  $\hat{r}$ , должна обратиться в ноль, поэтому, например, на экваторе сферы (где  $\vec{d} \cdot \hat{r} = 0$ ), мы имеем

$$-\frac{1}{a_0^3} \vec{d} + \vec{\mathcal{E}} = 0. \quad (2.19)$$

Таким образом, поляризуемость классической сферы

$$\boxed{\alpha = a_0^3}. \quad (2.20)$$

## 2.2. Поляризуемости высоковозбужденных атомных состояний

Рассмотреть зависимость электрической поляризуемости от главного квантового числа  $n$  (для высоковозбужденных состояний).

### Решение

В присутствии внешнего электрического поля уровень энергии  $k$  атома сдвигается по закону

$$\Delta E_k = \sum_i \frac{d_{ik}^2 \mathcal{E}^2}{E_k - E_i}, \quad (2.21)$$

где суммирование ведется по всем состояниям  $i$ , связанным с состоянием  $k$  электрическим дипольным оператором  $d$ , а дипольный матричный элемент  $d_{ik}$  (с осью квантования  $z$ ) дается выражением

$$d_{ik} = \langle i|d|k \rangle = -\langle i|ez|k \rangle = -\langle i|er \cos \theta|k \rangle. \quad (2.22)$$

Можно ожидать, что сумма (2.21) в основном формируется членами, соответствующими уровням с близкими значениями главного квантового числа  $n$ :  $n_i \approx n_k$ , поскольку для этих уровней энергетические знаменатели являются минимальными, а дипольные матричные элементы — большими из-за хорошего перекрыwania волновых функций. Дипольные матричные элементы линейно связаны с радиусами электронных орбит, которые меняются по закону  $n^2$ . Это можно видеть из сопоставления среднего значения энергии, определяемого теоремой вириала (формула (1.79))

$$\langle E_n \rangle = -\frac{e^2}{2} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle, \quad (2.23)$$

с формулой Бора (1.1)

$$E_n \approx -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (2.24)$$

Характер изменения энергетических знаменателей можно оценить, пользуясь тем фактом, что  $E_n \propto 1/n^2$ , поэтому плотность состояний, которые могут взаимодействовать с заданным состоянием, меняется по закону  $(dE_n/dn)^{-1} \propto n^3$ . Отметим, что число состояний  $i$ , относящихся к этой задаче, меньше полного числа состояний с различными значениями квантовых чисел  $n$ ,  $l$  и  $m$  (которое имеет дополнительный множитель  $\propto n^2$ ). Объясняется это тем, что электрическое поле, направленное по оси  $z$ , может связывать только состояния с одинаковыми значениями  $m$  и со значениями  $l$ , отличающимися на  $\pm 1$ .

Комбинируя масштабирующие множители ( $d_{ik} \propto n^2$  и  $E_i - E_k \propto n^{-3}$ ) в выражении (2.21), мы находим, что поляризуемости высоковозбужденных состояний меняются по закону

$$\alpha \propto n^7, \quad (2.25)$$

что подтверждается более основательными расчетами (см., например, [Bethe и Salpeter (1977)]).

### 2.3. Применение штарковских сдвигов для измерений электрических полей

Допустим, что мы проводим измерение напряженности электрического поля по квадратичному штарковскому сдвигу определенного уровня энергии атома. Допустим, что штарковский сдвиг  $\Delta E$  может быть измерен с абсолютной точностью  $\delta \Delta E$ , которая не зависит от величины поля и дается отношением

$$\frac{\delta \Delta E}{|\Delta E|} = 10^{-4} \quad (2.26)$$

для электрического поля напряженностью  $\mathcal{E} = 10$  кВ/см.

**(а)** Какова неопределенность  $\delta \mathcal{E}$  определения  $\mathcal{E}$  для поля напряженностью  $\mathcal{E} \approx 10$  кВ/см?

**(б)** Каково минимальное поле  $\mathcal{E}^*$ , которое может быть измерено при заданной чувствительности  $\delta \Delta E$  к штарковским сдвигам?

#### Решение

**(а)** В самом низком порядке теории возмущений штарковский сдвиг пропорционален квадрату электрического поля (задача 2.1):

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2, \quad (2.27)$$

и, как задано, чувствительность к штарковскому сдвигу равна

$$\delta \Delta E = 10^{-4} \cdot |\Delta E(\mathcal{E} = 10 \text{ кВ/см})|. \quad (2.28)$$

Из выражения (2.27) следует соотношение между неопределенностью определения  $\mathcal{E}$  и чувствительностью к штарковскому сдвигу:

$$\delta \Delta E = \alpha \mathcal{E} \delta \mathcal{E}, \quad (2.29)$$

откуда мы получаем

$$\frac{\delta \Delta E}{|\Delta E|} = 2 \frac{\delta \mathcal{E}}{\mathcal{E}} = 10^{-4}. \quad (2.30)$$

Таким образом, неопределенность определения поля напряженностью 10 кВ/см равна

$$\delta \mathcal{E} = \frac{1}{2} \text{ В/см.} \quad (2.31)$$



(б) Поскольку чувствительность к штарковским сдвигам есть чувствительность абсолютная (не зависит от величины поля), мы получаем для любого поля  $\mathcal{E}^*$ :

$$\frac{\delta\Delta E}{\Delta E(\mathcal{E}^*)} = 10^{-4} \cdot \frac{(10 \text{ кВ/см})^2}{(\mathcal{E}^*)^2}. \quad (2.32)$$

Минимальное измеряемое поле определяется условием  $\delta\Delta E/|\Delta E| \approx 1$ . Это случается, когда

$$\mathcal{E}^* = 100 \text{ В/см.}$$

Почему минимальное измеряемое поле  $\mathcal{E}^*$  настолько больше, чем неопределенность определения большего поля? Основная идея состоит в том, что, если мы прикладываем малое поле  $\mathcal{E}'$  дополнительно к большему полю  $\mathcal{E}_0$ , то штарковский сдвиг описывается формулой

$$\Delta E = -\frac{\alpha}{2} (\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}')^2 \approx -\frac{\alpha}{2} (\mathcal{E}_0^2 + 2\mathcal{E}_0\mathcal{E}'). \quad (2.33)$$

Мы видим, что влияние слабого поля усиливается из-за присутствия сильного поля благодаря эффекту интерференции. Однако если имеется только слабое поле, штарковский сдвиг дается просто выражением

$$\Delta E = -\frac{\alpha}{2} (\mathcal{E}')^2, \quad (2.34)$$

и, следовательно, чувствительность к полю ниже.

Такого рода соображения оказываются также важными в экспериментах с атомами, когда измеряются малые амплитуды переходов, например, в экспериментах по наблюдению эффектов нарушения четности, где чрезвычайно малые амплитуды переходов, обусловленные слабым взаимодействием (задача 1.13) интерферируют с большими амплитудами переходов, возникающих вследствие электромагнитного взаимодействия, позволяя таким образом регистрировать эффекты нарушения четности.

## 2.4. Частоты ларморовой прецессии для щелочных атомов

Рассчитать факторы Ланде для атомного состояния  $^2S_{1/2}$  (например, для основного электронного состояния водорода, щелочных атомов и элементов группы 1В периодической таблицы (медь, серебро, золото)). Учесть влияние спина  $I$ , но пренебречь взаимодействием ядерного магнитного момента с внешним магнитным полем. Дать качественное объяснение относительного знака факторов Ланде для состояний с полным угловым моментом  $F = I \pm 1/2$  и относительных величин ларморовых частот для атомов с различными значениями  $I$ .

### Решение

Энергетический сдвиг уровней, обусловленный взаимодействием внешнего магнитного поля с магнитными моментами, связанными с орбитальным угловым моментом и спином электрона, дается выражением

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.35)$$

Пренебрегая влиянием ядерного магнитного момента, получаем, что магнитный момент заданного состояния атома описывается формулой

$$\vec{\mu} = -\mu_0(g_L\vec{L} + g_S\vec{S}), \quad (2.36)$$

где  $g_L = 1$  и  $g_S \approx 2$  — соответствующие факторы Ланде. Магнитный момент можно связать с полным угловым моментом состояния  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  следующим образом:

$$\vec{\mu} \approx -\mu_0(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\mu_0(\vec{J} + \vec{S}), \quad (2.37)$$

откуда следует, что

$$\langle \vec{\mu} \rangle = -\mu_0 \left( \langle \vec{J} \rangle + \frac{\langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle}{J(J+1)} \langle \vec{J} \rangle \right). \quad (2.38)$$

Здесь

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{\langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle}{J(J+1)} \langle \vec{J} \rangle \quad (2.39)$$

это среднее значение вектора  $\vec{S}$  по направлению  $\vec{J}$ , умноженное на единичный вектор, направленный по  $\vec{J}$  (это соотношение следует, в частности, из теоремы Вигнера–Эккарта, см. Приложение F). Теперь мы можем представить  $\langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle$  через набор собственных состояний системы. Используя соотношения

$$\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}, \quad (2.40)$$

$$L^2 = J^2 + S^2 - 2\vec{S} \cdot \vec{J}, \quad (2.41)$$

мы находим, что

$$\langle \vec{S} \cdot \vec{J} \rangle = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2}. \quad (2.42)$$

Соотношение между магнитным моментом системы и полным угловым моментом (2.38) приобретает вид

$$\vec{\mu} = -g_J\mu_0\vec{J}, \quad (2.43)$$

где

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (2.44)$$

Учет влияния ядра требует включения ядерного спина  $\vec{I}$  в полный угловой момент  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$ , но гамильтониан взаимодействия остается тем же самым, поскольку мы здесь пренебрегаем ядерным магнитным моментом, который примерно на три порядка меньше, чем магнетон Бора. Следовательно,  $g$ -фактор меняется в результате проектирования  $\vec{J}$  на  $\vec{F}$ . Расчеты аналогичны проведенным выше:

$$\vec{\mu} = -g_F\mu_0\vec{F}, \quad (2.45)$$

где

$$g_F = g_J \left[ \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \right]. \quad (2.46)$$

Для состояний  $^2S_{1/2}$ ,  $S = 1/2$ ,  $L = 0$ ,  $J = 1/2$  и  $g_J = 2$ . Полный угловой момент в этом случае может быть  $F = I \pm 1/2$ . Фактор Ланде дается выражением

$$g_F = \frac{F(F+1) + 3/4 - I(I+1)}{F(F+1)}. \quad (2.47)$$

При  $F = I + 1/2$  получаем

$$g_F = \frac{F(F+1) + 3/4 - (F-1/2)(F+1/2)}{F(F+1)} = \frac{F+1}{F(F+1)} = \frac{1}{F} = \frac{1}{I+1/2}, \quad (2.48)$$

а при  $F = I - 1/2$  получаем

$$g_F = \frac{F(F+1) + 3/4 - (F+1/2)(F+3/2)}{F(F+1)} = \frac{-F}{F(F+1)} = \frac{-1}{F+1} = \frac{-1}{I+1/2}. \quad (2.49)$$

Таким образом, факторы Ланде для атомных состояний  $^2S_{1/2}$  даются выражением

$$g_F = \pm \frac{2}{2I+1}. \quad (2.50)$$

Относительные знаки факторов Ланде и величин ларморовых частот могут быть поняты следующим образом. Момент силы  $\vec{\tau}$ , действующий на атом, почти целиком связан с магнитным моментом электрона, поэтому

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{F}}{dt} \approx \vec{\mu}_e \times \vec{B}. \quad (2.51)$$

Следовательно, фактор Ланде определяется соотношением между электронным угловым моментом (ответственным за  $\vec{\mu}_e$ ) и полным угловым моментом  $\vec{F}$ . Как видно из рис. 2.1, при  $F = I + 1/2$ , электронный угловой момент направлен вдоль полного

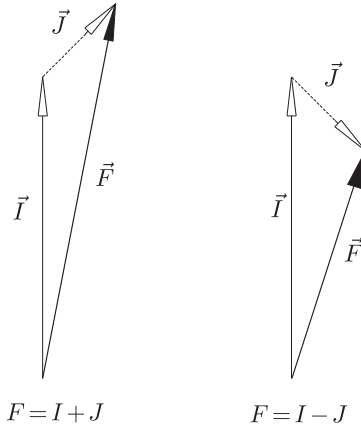


Рис. 2.1. Иллюстрация к относительной ориентации вектора  $\vec{J}$  по отношению к полному угловому моменту  $\vec{F}$  при  $F = I \pm J$

углового момента, и  $g$ -фактор положителен. Однако, когда  $F = I - 1/2$ , электронный угловой момент направлен против полного углового момента, и  $g$ -фактор отрицателен. Выражение (2.51) также показывает, что величина ларморовой частоты,

$\Omega_L = g_F \mu_0 B$ , должна падать с ростом  $I$ , поскольку  $F$  растет, в то время как  $\mu_e$  остается неизменным. В результате больший угловой момент должен «увлекаться» под действием заданного момента силы.

## 2.5. Магнитное поле внутри намагниченной сферы <sup>1)</sup>

Рассмотрим однородно намагниченный ансамбль идентичных парамагнитных атомов, заполняющих собой сферический объем радиуса  $R$ . Какое влияние на частоту магнитного резонанса этих атомов оказывает поле их собственной намагниченности? Эта задача имеет прямое отношение к магнитометрам с оптической накачкой, основанным на измерении частоты магнитного резонанса в ориентированных атомах, заключенных в газовую кювету (см., например, [Alexandrov и др. (1996)]).

### Решение

Напомним, прежде всего, что магнитное поле внутри однородно намагниченной сферы дается выражением (см., например, [Griffiths (1999)])

$$\vec{B} = \frac{8\pi M}{3} \hat{z}, \quad (2.52)$$

где  $\hat{z}$  — направление намагниченности. Важным моментом здесь является тот факт, что магнитное поле однородно и не зависит от радиуса сферы.

Таким образом, каждый атом внутри сферической колбы «видит» поле  $\vec{B}_0$ , равное векторной сумме внешнего поля  $\vec{B}_{\text{out}}$  и собственного поля (2.52) ориентированной парамагнитной среды:

$$\vec{B}_0 = \vec{B}_{\text{out}} + \vec{B}. \quad (2.53)$$

Казалось бы, это должно порождать систематическую ошибку показаний магнитометра, основанного на измерении частоты прецессии поляризованных атомов. Однако легко убедиться, что внутреннее поле не влияет на частоту прецессии атомов, поскольку оно в процессе прецессии всегда остается параллельным направлению поляризации атомов, а потому не приводит к их эволюции в пространстве. Это непосредственно следует из уравнения (2.56) (см. ниже), где  $\vec{B}_0 = \vec{B}_{\text{out}} + \vec{B}_J$ , причем поле  $\vec{B}_J$ , вычисляемое по формуле (2.52), всегда направлено параллельно вектору  $\vec{J}$ .

Строго говоря, этот вывод справедлив только для магнитометра со сферической колбой. Однако реально поле  $\vec{B}_J$  очень мало (из-за малой концентрации парамагнитных атомов), так что и в случае несферической кюветы соответствующая систематическая ошибка обычно пренебрежимо мала.

## 2.6. Классическая модель магнитного резонанса

В этой задаче мы рассмотрим важное явление *магнитного резонанса* — техники, широко применяемой в физике, химии, биологии и медицине. Основные принципы магнитного резонанса могут быть использованы для объяснения эффектов периодиче-

<sup>1)</sup> Этот параграф после обсуждения с авторами несколько скорректирован по отношению к оригинальному тексту. — *Примеч. ред.*

ских возмущений атомных состояний. Многие из обсуждаемых здесь понятий будут полезны для решения последующих задач. Отметим, что аргументы, используемые в этой задаче, являются чисто классическими в том смысле, что они не используют понятий из квантовой механики (тем не менее, применимы, с некоторыми незначительными изменениями, к квантовым системам).

**(а)** Рассмотреть частицу с магнитным моментом  $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$ , где  $\gamma$  — *гиромагнитное отношение*, а  $\vec{J}$  — полный угловой момент частицы. Показать, что  $\vec{J}$  прецессирует вокруг статического магнитного поля  $\vec{B}_0$  с ларморовой частотой  $\Omega_0 = \gamma B_0$ . Предположить, что  $\vec{B}_0$  включается внезапно (т. е. магнитное поле включается неадиабатически — более детально мы обсудим это в п. (г)).

**(б)** Рассмотреть эту прецессию в системе координат, вращающейся по отношению к лабораторной с угловой скоростью  $\vec{\omega}$ . Показать, что во вращающейся системе координат магнитный диполь прецессирует, как если бы существовало дополнительное «фиктивное» магнитное поле  $\vec{B}_f = \vec{\omega}/\gamma$ .

**(в)** Теперь включаем дополнительное магнитное поле  $\vec{B}_\perp(t)$ , вращающееся в плоскости, перпендикулярной  $\vec{B}_0$  (опять включение производится неадиабатически). Выбирая направление  $z$  вдоль  $\vec{B}_0$ , мы можем сказать, что

$$\vec{B}_\perp(t) = B_\perp \sin \omega t \hat{x} + B_\perp \cos \omega t \hat{y}. \quad (2.54)$$

Переходя в систему координат, вращающуюся таким образом, что  $\vec{B}_\perp(t)$ , оказывается стационарным, найти временную зависимость проекции  $\vec{J}$  на ось  $z$ ,  $J_z(t)$ . Обратить внимание на резонанс, проявляющийся при  $\omega = \Omega_L$ .

**(г)** Рассмотреть ансамбль частиц с магнитными моментами  $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$ , ориентированными навстречу  $\vec{B}_0$ . Допустим, мы хотим перевернуть диполи таким образом, чтобы они оказались направленными вдоль  $\vec{B}_0$ . Один из способов совершить это состоит в использовании методов магнитного резонанса, рассмотренных в пп. (а)–(в) этой задачи. Для того чтобы перевернуть максимальное число магнитных моментов, мы должны точно подстроить длительность  $\tau$  и поле  $\vec{B}_\perp(t)$ , чтобы создать так называемый  $\pi$ -импульс (где  $\gamma B_\perp \tau = \pi$ ,  $\omega = \Omega_L$ ). Этот метод становится менее эффективным в присутствии градиентов магнитного поля, т. е. если не все частицы ансамбля видят одно и то же поле.

Существует более надежный метод, который использует понятие *адиабатического прохождения*. Допустим, что вместо резкого включения поля  $\vec{B}_\perp(t)$  мы начинаем вращать поле  $\vec{B}_\perp(t)$  на частоте  $\omega \ll \Omega_L$  и затем медленно сканируем частоту через резонансное значение до тех пор, пока не достигаем  $\omega \gg \Omega_L$ <sup>1)</sup>.

Объяснить, каким образом этот метод позволяет переворачивать магнитные диполи и при каких условиях он применим.

### Решение

**(а)** Магнитное поле  $\vec{B}_0$  создает на магнитном диполе момент силы  $\vec{\tau}$ :

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}_0 = \gamma \vec{J} \times \vec{B}_0, \quad (2.55)$$

<sup>1)</sup> В действительности этот метод работает одинаково хорошо, если начинать с  $\omega \gg \Omega_L$  и двигаться по направлению к  $\omega \ll \Omega_L$ , а также если сканировать  $\Omega_L$  путем изменения  $\vec{B}_0$ .

что заставляет угловой момент меняться по закону

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \gamma \vec{J} \times \vec{B}_0. \quad (2.56)$$

Пусть  $\vec{B}_0$  направлено по оси  $\hat{z}$ , а угловой момент  $\vec{J}$  составляет угол  $\theta$  с вектором  $\vec{B}_0$  (рис. 2.2). Тогда, в соответствии с уравнением (2.56), изменение  $\theta$  за время  $dt$  дается выражением

$$d\vec{J} = \gamma J B_0 \sin \theta dt \hat{e}_\phi, \quad (2.57)$$

где единичный вектор  $\hat{e}_\phi$  направлен по нормали к плоскости, содержащей векторы  $\vec{B}_0$  и  $\vec{J}$ , а  $J = |\vec{J}|$ . Мы также имеем (рис. 2.2):

$$d\vec{J} = J \sin \theta d\phi \hat{e}_\phi. \quad (2.58)$$

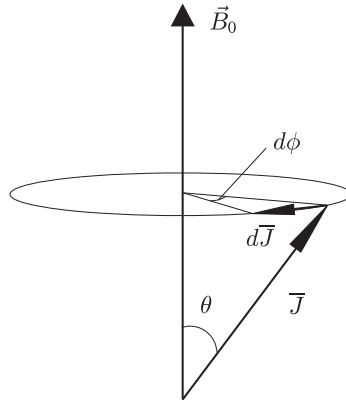


Рис. 2.2. Момент силы, действующей на магнитный диполь  $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$  в статическом магнитном поле  $\vec{B}_0$ , приводит к прецессии магнитного диполя (подробности — в тексте)

Таким образом, из уравнений (2.57) и (2.58) мы находим, что  $\vec{J}$  и  $\vec{\mu}$  прецессируют вокруг  $\vec{B}_0$  с частотой

$$\boxed{\Omega_L \equiv \frac{d\phi}{dt} = \gamma B_0.} \quad (2.59)$$

**(6)** Эволюция вектора  $\vec{v}$  в лабораторной системе координат связана с его эволюцией в системе координат, вращающейся с угловой скоростью  $\vec{\omega}$ , классической формулой (см., например, [Marion и Thornton (1995)])

$$\left. \frac{d\vec{v}}{dt} \right|_{\text{lab}} = \left. \frac{d\vec{v}}{dt} \right|_{\text{rotating}} + \vec{\omega} \times \vec{v}. \quad (2.60)$$

Мы знаем, что в лабораторной системе координат эволюция вектора  $\vec{J}$  подчиняется уравнению (2.56), поэтому, используя уравнение (2.60), мы находим, что во вращающейся системе координат

$$\left. \frac{d\vec{J}}{dt} \right|_{\text{rotating}} = \gamma \vec{J} \times \left[ \vec{B}_0 + \frac{\vec{\omega}}{\gamma} \right]. \quad (2.61)$$

Сравнивая уравнения (2.61) и (2.56), мы видим, что во вращающейся системе координат кажущееся магнитное поле, действующее на диполь, не  $\vec{B}_0$ , а  $\vec{B}_0 + \vec{B}_f$ , где  $\vec{B}_f$  — «фиктивное» поле, величина которого дается выражением

$$\vec{B}_f = \frac{\vec{\omega}}{\gamma}. \quad (2.62)$$

Заметим, что если частота вращения системы координат выбрана так, что  $\vec{\omega} = -\gamma\vec{B}_0$ , диполь в этой системе стационарен.

**(в)** Если мы переходим в систему координат, вращающуюся таким образом, что  $\vec{B}_\perp$  оказывается стационарным, то, как мы видели в п. (б), кажущееся магнитное

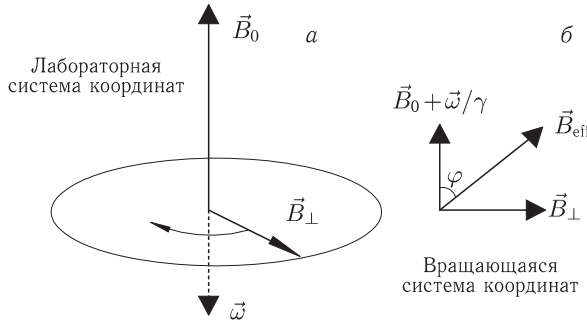


Рис. 2.3. Магнитные поля в лабораторной (а) и во вращающейся (б) системах координат

поле, направленное по оси  $\hat{z}$ , имеет величину  $B_0 - \omega/\gamma$  (рис. 2.3). Таким образом, во вращающейся системе координат диполь видит эффективное статическое магнитное поле  $\vec{B}_{\text{eff}}$ , величина которого равна

$$B_{\text{eff}} = \sqrt{B_\perp^2 + \left(B_0 - \frac{\omega}{\gamma}\right)^2}. \quad (2.63)$$

Угол  $\varphi$  между  $\vec{B}_{\text{eff}}$  и осью  $z$  определяется соотношением

$$\sin \varphi = \frac{B_\perp}{B_{\text{eff}}} = \frac{\gamma B_\perp}{\sqrt{(\gamma B_\perp)^2 + (\Omega_L - \omega)^2}}. \quad (2.64)$$

Диполь  $\vec{\mu}$  прецессирует вокруг  $\vec{B}_{\text{eff}}$  с частотой

$$\Omega = \sqrt{(\gamma B_\perp)^2 + (\Omega_L - \omega)^2}. \quad (2.65)$$

Как видно из диаграммы на рис. 2.4, амплитуда изменения проекции  $\vec{J}$  на ось  $z$  дается выражением

$$\frac{\Delta J_z}{J} = \sin^2 \varphi = \frac{(\gamma B_\perp)^2}{(\gamma B_\perp)^2 + (\Omega_L - \omega)^2}. \quad (2.66)$$

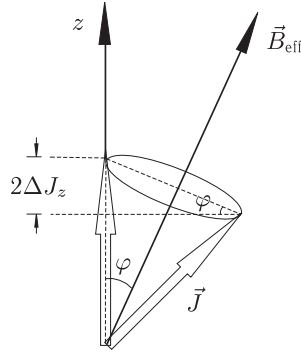


Рис. 2.4. Прецессия углового момента вокруг эффективного магнитного поля во вращающейся системе координат

Таким образом (после некоторых тригонометрических подстановок и алгебраических преобразований), находим окончательную временную зависимость  $J_z$ :

$$\boxed{\frac{J_z(t)}{J} = 1 - 2 \sin^2 \varphi \sin^2 \left( \frac{\Omega t}{2} \right)}, \quad (2.67)$$

где  $\Omega$  дается выражением (2.65), а  $\sin^2 \varphi$  — выражением (2.66).

Из уравнений (2.66) и (2.65) видно, что в случае  $\omega = \Omega_L$ ,  $\sin^2 \varphi = 1$  и  $\Omega = \gamma B_{\perp}$ . Согласно уравнению (2.67), это означает, что  $J_z$  осциллирует между  $\pm J$  на частоте  $\Omega$ . Это происходит потому, что, когда  $\vec{B}_{\perp}$  вращается на частоте  $\Omega_L$ , во вращающейся системе координат поле вдоль оси  $z$  оказывается равным нулю, и диполь прецессирует вокруг  $\vec{B}_{\perp}$  на соответствующей ларморовой частоте  $\gamma B_{\perp}$ . В этом состоит суть явления магнитного резонанса.

**(r)** Вновь будем работать в системе координат, вращающейся синхронно с полем  $\vec{B}_{\perp}(t)$ . В этой системе координат магнитные диполи видят эффективное поле  $\vec{B}_{\text{eff}}$ , величина которого дается выражением (2.63) и которое составляет угол  $\varphi$  (определяемый формулой (2.64)) к направлению  $\vec{B}_0$  (см. рис. 2.3). Если мы медленно сканируем частоту  $\omega$ , то магнитные диполи адиабатически следуют за эффективным полем. Эффективное магнитное поле, схематично показанное как функция времени на рис. 2.5, вращается от направления, параллельного  $\vec{B}_0$ , к направлению антипараллельному  $\vec{B}_0$ . Отсюда следует, что эта процедура инвертирует все спины.

Какие условия обеспечивают адиабатичность?

Очевидно, что спины должны совершить много периодов прецессии вокруг  $\vec{B}_{\text{eff}}$  за временной интервал, в течение которого поле испытывает значительные изменения, т. е.

$$\gamma B_{\text{eff}} \gg \left| \frac{1}{\vec{B}_{\text{eff}}} \frac{\partial \vec{B}_{\text{eff}}}{\partial t} \right|. \quad (2.68)$$

Предполагая постоянную скорость сканирования частоты  $\dot{\omega}$ , условие адиабатичности выполняется до тех пор, пока

$$\boxed{\dot{\omega} \ll \gamma^2 B_{\perp}^2}. \quad (2.69)$$



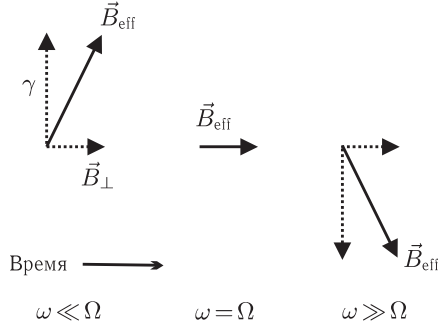


Рис. 2.5. Эффективное магнитное поле во вращающейся системе координат при сканировании частоты поперечного магнитного поля через резонанс

## 2.7. Сдвиги уровней энергии в осциллирующих полях (У)

В этом разделе мы анализируем сдвиг уровней энергии атома под действием электрического поля, которое меняется во времени — так называемый динамический эффект Штарка. Динамический эффект Штарка лежит в основе явлений лазерного пленения и охлаждения атомов и множества других нелинейных эффектов.

Мы также увидим, что случай зависящего от времени магнитного поля (динамический эффект Зеемана) полностью аналогичен динамическому эффекту Штарка, когда к атомной системе приложено сильное статическое поле  $\vec{B}_0$  и слабое осциллирующее поле, перпендикулярное к  $\vec{B}_0$ <sup>1)</sup>.

Рассмотрим атом с двумя состояниями  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  с энергетическим зазором  $\omega_0$  (в этой задаче мы используем единицы, в которых  $\hbar = 1$ ). Эти состояния связаны электрическим дипольным оператором  $d$ , и к атому приложено синусоидально меняющееся электрическое поле  $\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t$ . В дальнейшем в этой задаче мы будем пренебрегать ширинами энергетических уровней, т.е. скорость релаксации  $\Gamma$  для этих состояний считается много меньшей всех других актуальных частот системы ( $|\omega_0 - \omega_m|$ ,  $\omega_0$ ,  $\omega_m$ ). Амплитуда приложенного поля  $\mathcal{E}_0$  достаточно мала, так что влияние электрического поля может рассматриваться как слабое возмущение, т.е.  $d\mathcal{E}_0 \ll |\omega_0 - \omega_m|, \omega_m, \omega_0$ .

Заметим также, что это обсуждение тесно связано с задачей 3.1, которая рассматривает переходы между состояниями двухуровневой системы, индуцированные периодическим возмущением.

**(а)** Показать, что в случае, когда частота колебаний  $\omega_m$  поля мала по сравнению с частотой перехода ( $\omega_0 \gg \omega_m$ ), энергетические сдвиги уровней энергии даются выражением

$$\Delta E \approx \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{2\omega_0}, \quad (2.70)$$

<sup>1)</sup> Между эффектами Зеемана и Штарка существует принципиальное различие, состоящее в том, что магнитное поле приводит к энергетическим сдвигам первого порядка, тогда как электрические поля вызывают энергетические сдвиги только во втором порядке теории возмущений. Однако, в присутствии сильного магнитного поля дополнительные слабые поперечные поля приводят только к энергетическим сдвигам второго порядка, делая этот случай полностью аналогичным эффекту Штарка

где знаки плюс и минус относятся, соответственно, к верхнему и нижнему состояниям. Изобразить энергетический спектр для случая, когда  $\omega_m \ll d^2 \mathcal{E}_0^2 / \omega_0$  и в противоположном случае  $\omega_m \gg d^2 \mathcal{E}_0^2 / \omega_0$ .

### Подсказки

Для описания энергетического спектра полезно посмотреть, как разность энергий между состояниями приводит к зависимости от времени квантово-механической фазы. Здесь атомные состояния можно рассматривать как осцилляторы, частоты которых модулируются эффектом Штарка. Рассматриваемый спектр также аналогичен спектру частотно-модулированного света (см. задачу 8.3).

Энергетический спектр может быть описан в терминах *боковых частот*, чьи носительные амплитуды даются функциями Бесселя  $J_n(\alpha)$  ( $\alpha$  — индекс модуляции), используя формулу (см., например, [Arfken (1985), Siegman (1986)]):

$$e^{i\alpha \sin \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\alpha) e^{in\theta}. \quad (2.71)$$

### Решение

Когда поле меняется с частотой  $\omega_m \ll \omega_0$ , на коротких временах электрическое поле эффективно является постоянным. Следовательно, зависящие от времени сдвиги энергетических уровней описываются простой формулой для эффекта Штарка в постоянном поле (2.21):

$$\Delta E(t) = \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\omega_0} \sin^2 \omega_m t, \quad (2.72)$$

где мы используем меняющееся во времени поле (со специально выбранной фазой) вместо статического поля, а знаки плюс и минус относятся, соответственно, к верхнему и нижнему состояниям. Средние значения сдвигов, таким образом, даются формулой (2.70)

$$\Delta E \approx \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{2\omega_0}.$$

В соответствие с (2.72), мгновенная энергия, например, состояния  $|b\rangle$  дается выражением

$$\omega(t) = \omega_0 + \Delta E(t) = \quad (2.73)$$

$$= \omega_0 + \Omega \sin^2 \omega_m t = \quad (2.74)$$

$$= \omega_0 + \frac{\Omega}{2} - \frac{\Omega}{2} \cos 2\omega_m t, \quad (2.75)$$

где  $\Omega = d^2 \mathcal{E}_0^2 / \omega_0$ . Фаза  $\varphi(t)$ , приобретенная состоянием  $|b\rangle$  в процессе своей временной эволюции, описывается интегралом

$$\varphi(t) = \int_0^t \omega(t') dt' = \left( \omega_0 + \frac{\Omega}{2} \right) t - \left( \frac{\Omega}{4\omega_m} \right) \sin 2\omega_m t. \quad (2.76)$$

Зависящее от времени состояние  $|\psi_b(t)\rangle = e^{-i\varphi(t)}|b\rangle$  может быть описано с помощью формулы (2.71)

$$|\psi_b(t)\rangle = e^{-i(\omega_0 + \Omega/2)t} |b\rangle \sum_{-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{\Omega}{4\omega_m}\right) e^{i2n\omega_m t}. \quad (2.77)$$

Таким образом, мы видим, что энергетический спектр описывается набором боковых частот, центрированных на частоте  $\omega_0 + \Omega/2$  и разнесенных на спектральные интервалы  $2\omega_m$ . Статистический вес <sup>1)</sup> каждой энергетической компоненты дается квадратом функции Бесселя  $J_n(\alpha)$ , где индекс модуляции  $\alpha = \Omega/4\omega_m$ .

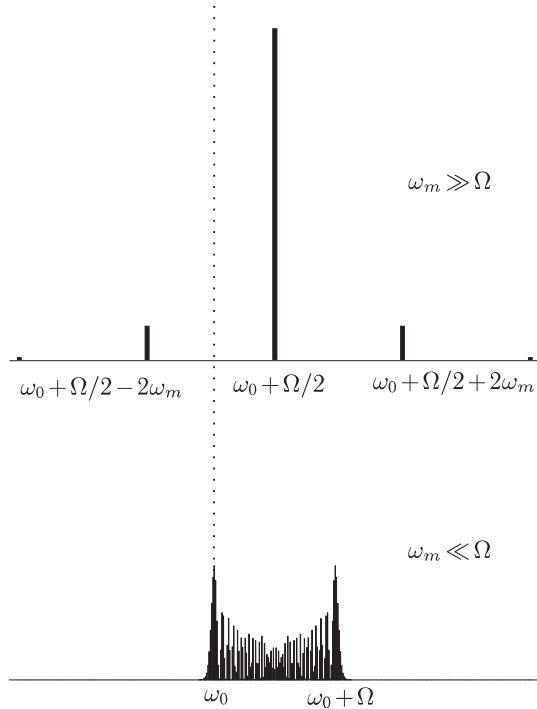


Рис. 2.6. Энергетический спектр верхнего состояния двухуровневой системы, подвергнутой действию осциллирующего электрического поля. Отметим, что вертикальный масштаб для двух графиков — не один и тот же (амплитуды боковых частот на нижнем графике в действительности много меньше, чем изображенные, если их сопоставлять с амплитудами на верхнем графике)

Характер этого спектра обсуждается в задаче 8.3. При  $\omega_m \ll \Omega$  индекс модуляции велик:  $\alpha \gg 1$ . Это соответствует медленному сканированию частоты. При этом генерируется спектр, показанный на нижнем графике рис. 2.6. При  $\omega_m \gg \Omega$  в спектре доминирует одиночная сильная линия на частоте  $\omega_0 + \Omega/2$ ; следующие наиболее

<sup>1)</sup> Под статистическим весом мы понимаем следующее. Пусть первоначально атом находится в одном из состояний, подвергнутых действию осциллирующего электрического поля. Измерим его энергию с помощью, например, пробного поля. Статистический вес дает нам вероятность того, что измеряемое состояние имеет заданную энергию.

сильные компоненты наблюдаются на частотах, смещенных на  $\pm 2\omega_m$  относительно центральной частоты (верхний график рис. 2.6).

**(б)** В ситуации, близкой к резонансной ( $\omega_0 \approx \omega_m$ ) среднюю величину динамического эффекта Штарка можно найти относительно простым способом, производя унитарное преобразование с использованием оператора  $U$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_m t} \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

так что гамильтониан системы приобретает вид

$$H' = U^\dagger H U, \quad (2.79)$$

а состояния преобразуются как

$$|\psi'\rangle = U^\dagger |\psi\rangle. \quad (2.80)$$

Унитарное преобразование модифицирует следующим образом зависящее от времени уравнение Шрёдингера (напомним, что мы положили  $\hbar = 1$ )<sup>1)</sup>:

$$\left( H' - iU^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} \right) |\psi'\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle, \quad (2.81)$$

и «эффективный гамильтониан» в новом базисе приобретает вид

$$\tilde{H} = U^\dagger H U - iU^\dagger \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (2.82)$$

Оказывается, что это преобразование математически эквивалентно переходу во *вращающуюся систему координат* (как это делалось для случая магнитного момента во внешнем магнитном поле в задаче 2.6). Следующий шаг состоит в том, чтобы применить *приближение вращающейся волны* (когда игнорируются все быстро осциллирующие члены гамильтониана). Заметим, что член  $-iU^\dagger \frac{\partial U}{\partial t}$  эффективного гамильтониана учитывает тот факт, что «вращающаяся система координат» не является инерционной, что делает энергетическое расстояние между уровнями равным  $\omega_0 - \omega_m$  (см. задачу 2.6)<sup>2)</sup>.

<sup>1)</sup> Уравнение (2.81) может быть выведено исходя из обычного зависящего от времени уравнения Шрёдингера

$$H|\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle,$$

домножая обе стороны уравнения на  $U^\dagger$  и подставляя оператор тождественного преобразования  $UU^\dagger$  в соответствующие места:

$$U^\dagger H U U^\dagger |\psi\rangle = iU^\dagger \frac{\partial}{\partial t} U U^\dagger |\psi\rangle,$$

$$H' |\psi'\rangle = iU^\dagger \frac{\partial}{\partial t} U |\psi'\rangle,$$

$$H' |\psi'\rangle = iU^\dagger \left[ \left( \frac{\partial U}{\partial t} \right) |\psi'\rangle + U \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle \right].$$

Здесь мы воспользовались уравнениями (2.79) и (2.80), и полученный результат приводит нас непосредственно к (2.81).

<sup>2)</sup> «Переход во вращающуюся систему координат» и применение «приближения вращающейся волны» — это не что иное, как обычные математические преобразования. Геометрическая интерпретация этой математики вполне разумна в случае магнитного резонанса

Найти динамические штарковские сдвиги в этих режимах.

### Решение

Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t \\ -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t & \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (2.83)$$

и во «вращающейся системе координат» для эффективного гамильтониана мы имеем (выражение (2.82))

$$\tilde{H} = U^\dagger H U - iU^\dagger \frac{\partial U}{\partial t} = \quad (2.84)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{d\mathcal{E}_0}{2i}(1 - e^{-2i\omega_m t}) \\ \frac{d\mathcal{E}_0}{2i}(1 - e^{2i\omega_m t}) & \omega_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\omega_m \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

Мы видим, что гамильтониан включает в себя две составляющие — статическую и быстро вращающуюся. Последняя эффективно зануляется при усреднении (в приближении вращающейся волны эта быстро вращающаяся составляющая игнорируется). В результате мы получаем

$$\tilde{H} \approx \begin{pmatrix} 0 & -\frac{d\mathcal{E}_0}{2i} \\ \frac{d\mathcal{E}_0}{2i} & \omega_0 - \omega_m \end{pmatrix}. \quad (2.86)$$

Во вращающейся системе координат мы имеем обычный эффект Штарка на двух уровнях, разнесенных на энергетическое расстояние  $\omega_0 - \omega_m$ , вызванный электрическим полем  $\mathcal{E}_0/2$ <sup>1)</sup>. В соответствии с (2.21), динамические штарковские сдвиги в таком режиме даются выражением

$$\Delta E \approx \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}, \quad (2.87)$$

где, как и раньше, «+» соответствует верхнему состоянию, а «-» — нижнему состоянию.

**(в)** Как отмечалось выше, существует прямая аналогия между динамическим штарковским сдвигом и динамическим зеемановским сдвигом. Рассмотрим систему со спином 1/2 (например, электрон), находящуюся в сильном магнитном поле  $\vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$ , приводящему к зеемановскому расщеплению  $\omega_0 = g\mu_0 B_0$  (где  $g$  — со-

(задача 2.6); однако, во многих случаях при подобном математическом преобразовании такой геометрический язык неприменим. Тем не менее, из-за близкой математической аналогии между такой ситуацией и магнитным резонансом, такая терминология находит универсальное применение.

<sup>1)</sup> В формуле (2.86) полный множитель, стоящий перед  $i$  (в сопоставлении со стандартным гамильтонианом для эффекта Штарка в постоянном поле) — это просто фаза, возникающая вследствие того, что осциллирующее поле выбрано пропорциональным  $\sin(\omega_m t)$ , а не  $\cos(\omega_m t)$ . На собственные энергии системы этот множитель влияния не оказывает.

ответствующий фактор Ланде, для электрона  $g \approx 2$ ). К атому приложено слабое осциллирующее поперечное магнитное поле

$$\vec{B}_\perp(t) = B_\perp \sin(\omega_m t) \hat{x}. \quad (2.88)$$

Здесь  $\mu_0 B_\perp$  является аналогом  $d\mathcal{E}_0$  для случая электрического поля.

Полагая, что  $\mu_0 B_\perp \ll |\omega_0 - \omega_m|$  (приближение слабого поля), найти средние сдвиги уровней энергии, обусловленные поперечным полем. Для этого перейти в систему координат, вращающуюся с частотой  $\omega_m$  в том же направлении, в котором происходит ларморова прецессия в поле  $B_0$ . Использовать приближение вращающейся волны. Для того чтобы описать эволюцию углового момента в такой вращающейся системе координат, удобно ввести дополнительное фиктивное поле (задача 2.6)

$$\vec{B}_f = -\frac{\vec{\omega}_m}{g\mu_0}, \quad (2.89)$$

учитывающее влияние вращения.

### Решение

Осциллирующее поперечное магнитное поле (2.88) может быть представлено в виде суммы двух магнитных полей, вращающихся в противоположных направлениях:

$$\vec{B}_\perp(t) = \frac{B_\perp}{2} (\sin \omega_m t \hat{x} + \cos \omega_m t \hat{y}) + \frac{B_\perp}{2} (\sin \omega_m t \hat{x} - \cos \omega_m t \hat{y}). \quad (2.90)$$

Гамильтониан, описывающий взаимодействие поля  $\vec{B}_\perp(t)$  с атомом, имеет вид

$$H_\perp = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_\perp(t), \quad (2.91)$$

и можно выразить магнитный момент (будем полагать, что имеем дело с электроном:  $g \approx 2$ ) через матрицы Паули:

$$\vec{\mu} = -\mu_0 \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{x} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \hat{y} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{z} \right], \quad (2.92)$$

где мы используем спинорное представление, для которого

$$|b\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

$$|a\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.94)$$

Используя выражения (2.90) и (2.92) в (2.91), после простых алгебраических преобразований находим

$$H_\perp = \frac{\mu_0 B_\perp}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\omega_m t} \\ ie^{-i\omega_m t} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & ie^{-i\omega_m t} \\ -ie^{i\omega_m t} & 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (2.95)$$

Теперь перейдем в систему координат, вращающуюся с частотой  $\omega_m$ . Это преобразование приводит к двум эффектам: (1) одна из вращающихся компонент поперечного поля утрачивает временную зависимость и превращается в статическое поле, тогда как вторая компонента начинает вращаться на удвоенной частоте, и (2) меняется

характер эволюции углового момента; для учета этого эффекта мы вводим фиктивное магнитное поле из (2.89) (см. задачу 2.6). Во вращающейся системе координат наш возмущающий гамильтониан теперь выглядит следующим образом:

$$H_{\perp}^{(\text{rot})} = \frac{i\mu_0 B_{\perp}}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & e^{-i2\omega_m t} \\ -e^{i2\omega_m t} & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (2.96)$$

тогда как гамильтониан, учитывающий сильное поле и фиктивное поле имеет вид

$$H_0^{(\text{rot})} = \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega_m & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.97)$$

Наш следующий шаг — воспользоваться приближением вращающейся волны. Мы просто опускаем все быстро осциллирующие члены, что позволяет исключить вторую матрицу в (2.96). В результате мы остаемся с гамильтонианом

$$H_{\text{tot}}^{(\text{rot})} \approx \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega_m & -i\mu_0 B_{\perp}/2 \\ i\mu_0 B_{\perp}/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.98)$$

Множители  $1/2$  в недиагональных элементах матрицы в (2.98) связаны с тем фактом, что при использовании приближения вращающейся волны мы отбросили половину поперечного поля. Находя собственные значения этой матрицы, мы определяем возмущенные энергии:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( \omega_0 - \omega_m \pm \sqrt{\mu_0^2 B_{\perp}^2 + (\omega_0 - \omega_m)^2} \right). \quad (2.99)$$

Воспользуемся теперь допущением  $\mu_0 B_{\perp} \ll |\omega_0 - \omega_m|$ , чтобы упростить уравнение (2.99):

$$E_{+} \approx \omega_0 - \omega_m + \frac{\mu_0^2 B_{\perp}^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}, \quad (2.100)$$

$$E_{-} \approx -\frac{\mu_0^2 B_{\perp}^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}. \quad (2.101)$$

И, наконец, возвращаясь назад к неподвижной системе координат, мы исключаем энергетический сдвиг, связанный с фиктивным полем (2.89), и находим

$$E_{+} \approx \omega_0 + \frac{\mu_0^2 B_{\perp}^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}, \quad (2.102)$$

$$E_{-} \approx -\frac{\mu_0^2 B_{\perp}^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}. \quad (2.103)$$

Эти результаты идентичны результатам, полученным для динамического штарковского сдвига, если заменить  $\mu_0 B_{\perp}$  на  $d\mathcal{E}_0$  (формула (2.87)):

$$\Delta E \approx \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}.$$

**(г)** Можно воспользоваться более формализованным подходом (см., например, монографию [Townes и Schawlow (1975)]), чтобы получить общее выражение для

динамического эффекта Штарка, которое будет нам полезно в ряде последующих задач. Согласно зависящему от времени уравнению Шрёдингера, в отсутствие электрического поля атомные состояния описываются выражениями

$$|\psi_a^{(0)}(t)\rangle = |a\rangle, \quad (2.104)$$

$$|\psi_b^{(0)}(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t} |b\rangle. \quad (2.105)$$

В присутствии внешнего поля реальные состояния атома  $|\psi_a(t)\rangle$  и  $|\psi_b(t)\rangle$  являются суперпозициями этих невозмущенных состояний <sup>1)</sup>:

$$|\psi_b(t)\rangle = c_a(t)|a\rangle + c_b(t)e^{-i\omega_0 t}|b\rangle. \quad (2.106)$$

Найти дифференциальные уравнения для амплитуд  $c_a(t)$  и  $c_b(t)$ .

### Решение

Наша задача — найти дифференциальные уравнения для коэффициентов  $c_a(t)$  и  $c_b(t)$  в уравнении (2.106). Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t \\ -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (2.107)$$

Согласно зависящему от времени уравнению Шрёдингера, эволюция атомного состояния подчиняется уравнению

$$i \frac{d}{dt} |\psi_b(t)\rangle = H |\psi_b(t)\rangle. \quad (2.108)$$

Подставляя (2.106) и (2.107) в (2.108), получаем

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_a(t) \\ c_b(t)e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t & c_b(t)e^{-i\omega_0 t} \\ -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t & c_a(t) + \omega_0 c_b(t)e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix}, \quad (2.109)$$

откуда

$$\boxed{\frac{dc_a}{dt} = id\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t \, c_b(t)e^{-i\omega_0 t}}, \quad (2.110)$$

$$\boxed{\frac{dc_b}{dt} = id\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t \, c_a(t)e^{i\omega_0 t}}. \quad (2.111)$$

(д) Предполагая, что в дифференциальных уравнениях из п. (б)  $c_a(0) \approx 0$  и  $c_b(t) \approx e^{-i\varphi(t)}$ , можно получить интегральное уравнение для  $\varphi(t)$ . Мнимая часть  $\varphi$  описывает изменение амплитуды вероятности для атома быть обнаруженным в  $|b\rangle$  (т. е. представляет переходы между состояниями  $|b\rangle$  и  $|a\rangle$ ), а действительная часть  $\varphi$  описывает дополнительный фазовый сдвиг в эволюции состояния.

<sup>1)</sup> Такое представление атомных состояний называют *представлением взаимодействия* (см. [Griffiths (1996)]).



Таким образом, энергетический сдвиг состояния дается выражением (напоминаем, что  $\hbar = 1$ )

$$\Delta E = \frac{d}{dt} \operatorname{Re} [\varphi]. \quad (2.112)$$

Используя этот метод, найти общее выражение для динамического штарковского сдвига и показать, что оно согласуется с результатами пп. (а) и (б). Чтобы воспользоваться теорией зависящих от времени возмущений первого порядка, можно принять, что в данном случае  $|\varphi(t)| \ll 1$ .

### Решение

Подставляя  $c_b(t) = e^{-i\varphi(t)}$  в уравнение (2.111), имеем

$$\frac{d\varphi}{dt} e^{-i\varphi} = -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t c_a(t) e^{i\omega_0 t}. \quad (2.113)$$

Поскольку мы полагаем, что  $\varphi \ll 1$ , мы можем в последнем выражении положить  $e^{-i\varphi} \approx 1$ . В результате, мы находим

$$\frac{d\varphi}{dt} = -d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t c_a(t) e^{i\omega_0 t}. \quad (2.114)$$

Чтобы решить это уравнение, мы должны определить  $c_a(t)$ . Пользуясь тем же приближением ( $e^{-i\varphi} \approx 1$ ) в дифференциальном уравнении для  $c_a(t)$ , можем написать

$$c_a(t) = \int_0^t i d\mathcal{E}_0 \sin \omega_m t' e^{-i\omega_0 t'} dt'. \quad (2.115)$$

Этот интеграл можно упростить с помощью подстановки

$$\sin \omega_m t' = \frac{e^{i\omega_m t'} - e^{-i\omega_m t'}}{2i}, \quad (2.116)$$

после чего получаем

$$c_a(t) = \frac{d\mathcal{E}_0}{2i} \left[ \frac{e^{-i(\omega_0 - \omega_m)t}}{\omega_m - \omega_0} + \frac{e^{-i(\omega_0 + \omega_m)t}}{\omega_m + \omega_0} \right]. \quad (2.117)$$

Подставим теперь выражение для  $c_a(t)$  из (2.117) в (2.114), что позволяет нам написать интегральное уравнение для фазы  $\varphi(t)$ :

$$\varphi(t) = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4} \int_0^t (e^{i\omega_m t'} - e^{-i\omega_m t'}) \left( \frac{e^{i\omega_m t'}}{\omega_m - \omega_0} + \frac{e^{-i\omega_m t'}}{\omega_m + \omega_0} \right) dt'. \quad (2.118)$$

Осциллирующие члены при усреднении зануляются, откуда следует

$$\operatorname{Re} [\varphi(t)] = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4} \left[ \frac{t}{\omega_0 + \omega_m} + \frac{t}{\omega_0 - \omega_m} \right]. \quad (2.119)$$

Дифференцируя полученное уравнение (в соответствии с выражением (2.112)), находим формулу для динамического штарковского сдвига <sup>1)</sup>:

$$\Delta E = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{2} \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega_m^2}. \quad (2.120)$$

Заметим, что знак динамического штарковского сдвига зависит от знака расстрой-ки. Это означает, например, что световое поле, отстроенное от атомного резонанса в низкочастотную сторону, расталкивает уровни энергии, а поле, отстроенное в высокочастотную сторону, стягивает их. Эти световые сдвиги важны для экспериментов с лазерным захватом и лазерным охлаждением атомов.

В пределе  $\omega_m \ll \omega_0$ , как это было в п. (а), как легко видеть, уравнение (2.120) сводится к (2.70),

$$\Delta E \approx \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{2\omega_0},$$

тогда как при условии  $\omega_m \approx \omega_0$  мы получаем уравнение (2.87)

$$\Delta E \approx \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 - \omega_m)}.$$

Подчеркнем еще раз, что по ходу нашего рассмотрения мы всюду пренебрегали конечной (ненулевой) шириной  $\Gamma$  уровней энергии, поэтому полученные формулы не применимы в непосредственной близости от резонанса ( $|\omega_0 - \omega_m| \lesssim \Gamma$ ).

Когда частота модуляции сильно превосходит частоту перехода ( $\omega_m \gg \omega_0$ ), получаем

$$\Delta E \approx -\frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \omega_0}{2\omega_m^2}. \quad (2.121)$$

(е) При использовании приближения вращающейся волны в пп. (б) и (в) мы положили равными нулю все быстро осциллирующие члены гамильтониана. На самом деле, быстро осциллирующие члены (возникающие в результате действия компоненты поля со встречным вращением) проявляются в виде так называемого *сдвига Блоха–Зигерта*, который, в действительности, как мы увидим, является частью полного динамического штарковского сдвига, выведенного в предыдущем разделе (формула (2.120)).

<sup>1)</sup> Может возникнуть вопрос, каким образом формула (2.119) согласуется с нашим исходным предположением, что  $|\varphi(t)| \ll 1$ , коль скоро  $\varphi(t)$  линейно растет со временем. Мы использовали предположение  $|\varphi(t)| \ll 1$  чтобы решить дифференциальные уравнения в первом порядке. Теперь, когда мы получили решение первого приближения, мы можем подставить  $c_b(t) = e^{-i\Delta E t}$  в правую часть дифференциального уравнения (2.111) и получить таким образом решение для  $\varphi(t)$  во втором порядке. Оказывается, что полученное таким образом решение второго порядка эквивалентно формуле (2.119) с заменой  $\omega_0$  на  $\omega_0 + \Delta E$ . Поскольку  $\Delta E \ll \omega_0$ , этим изменением можно пренебречь; мы приходим к выводу, что наше решение является хорошим во всех порядках, и ограничение  $|\varphi(t)| \ll 1$  может быть снято.

Найти сдвиг Блоха–Зигерта уровней энергии, связанный с движением встречно вращающейся компоненты поля, которой мы пренебрегали в пп. (б) и (в) этой задачи.

### Решение

Интуитивно можно ожидать, что встречно вращающаяся компонента поля должна приводить к динамическому штарковскому сдвигу, возникающему вследствие влияния поля с частотой  $-\omega_m$ , вместо частоты  $\omega_m$ . Поэтому сдвиг Блоха–Зигерта может быть найден путем замены  $\omega_m - \omega_0$  в выражении (2.87) на  $\omega_m + \omega_0$ :

$$\Delta E_{BS} = \pm \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 + \omega_m)}, \quad (2.122)$$

где «+» относится к верхнему состоянию, а «-» — к нижнему состоянию. Эта формула может быть получена путем перехода во встречно вращающуюся систему координат с последующим применением тех же самых шагов, что и при получении формулы (2.87).

Поскольку как сдвиг Блоха–Зигерта (2.122), так и сдвиг, рассчитанный в пп. (б) и (в), являются малыми возмущениями полной энергии, они складываются независимо (любые корреляции являются поправками высших порядков, которыми можно пренебречь). Таким образом полные энергетические сдвиги даются выражением

$$\Delta E = \pm \left( \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 - \omega_m)} + \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{4(\omega_0 + \omega_m)} \right). \quad (2.123)$$

Выражение (2.123) совпадает с общей формулой (2.120) для динамического штарковского сдвига, полученной в п. (д) этого раздела.

## 2.8. Спиновая релаксации, связанная с неоднородностью магнитного поля

Рассмотрим атомы с полным угловым моментом  $F = 1/2$ , заключенные в ячейку радиусом  $R$ , не содержащую буферного газа, с внутренним антирелаксационным покрытием, препятствующим деполяризации при столкновениях со стенками. Столкновения со стенками, однако, меняют случайным образом скорости атомов.

(а) Пусть атомы ориентированы вдоль среднего магнитного поля  $\vec{B}_0$ , приложенного к ячейке. Определить скорость релаксации намагниченности, связанной с малыми градиентами магнитного поля. Принять, что градиенты поля соответствуют компонентам магнитного поля, перпендикулярным  $\vec{B}_0$  со среднеквадратичной дисперсией  $\Delta B \ll B_0$ . (Заметим, что характерные времена такой *продольной релаксации* обычно обозначают  $T_1$ , тогда как время *поперечной релаксации*, соответствующее релаксации атомной поляризации, перпендикулярной  $\vec{B}_0$ , обозначают через  $T_2$ ). Предполагать, что ларморова частота  $\Omega_L = \gamma B_0$  ( $\gamma$  — гиромагнитное отношение) много больше, чем частота столкновений атома со стенками:  $\Omega_L R/v \gg 1$ , где  $v$  — тепловая скорость атома.

(б) То же, что и в п. (а), но теперь предполагая, что  $\Omega_L R/v \ll 1$ .

**(в)** Как скорости  $1/T_1$ , определенные в пп. (а) и (б), будут меняться, если ячейка наполнена буферным газом так, что средняя длина свободного пробега атома  $\lambda \ll R$ ? Предполагать отсутствие деполяризации атомов при их столкновениях с атомами буферного газа.

**(г)** Для атомов, содержащихся в ячейке, лишенной буферного газа, оценить поперечную скорость релаксации  $1/T_2$ , связанную с малыми изменениями основного магнитного поля. Предполагать, что в одной половине ячейки магнитное поле равно  $B_0 + \Delta B$ , а в другой половине равно  $B_0 - \Delta B$ .

### Подсказка

В п. (а), когда атом летает по ячейке, он испытывает действие магнитного поля  $\approx B_0$  с направлением, медленно меняющимся из-за поперечных градиентов. Система координат, связанная с мгновенным направлением полного магнитного поля, при этом вращается с некоторой характерной угловой скоростью  $\vec{\omega}$ . Как и в задаче 2.7, удобно ввести дополнительное фиктивное поле  $\vec{B}_f = -\vec{\omega}/\gamma$ , которое учитывает эффекты вращения.

### Решение

**(а)** Представим себе атом, летающий от одной стенки кюветы к другой. Атом «видит» малое медленно меняющееся (по сравнению с ларморовой частотой) поперечное магнитное поле. Это соответствует вращению вектора полного магнитного поля с угловой частотой  $\vec{\omega}$  (перпендикулярно вектору полного поля). Величину  $\vec{\omega}$  можно оценить по формуле

$$\omega \sim \frac{\Delta B}{B_0} \frac{v}{R}, \quad (2.124)$$

поскольку  $\Delta B/B_0$  — это типичный угол, на который поле поворачивается с точки зрения атома, пролетающего через ячейку, а  $R/v$  — типичное время пролета атома через ячейку.

Рассмотрим теперь систему координат, движущуюся вместе с атомом, с осью  $z$  направленной вдоль полного магнитного поля  $\vec{B}_{\text{tot}}$  (состоящего из  $\vec{B}_0$  и малой добавки, связанной с неоднородностью поля). Поскольку ларморова частота много больше, чем обратное время пролета атома через ячейку  $R/v$ , атомная поляризация адиабатически следует за направлением  $z$ . Поскольку эта система координат вращается со скоростью  $\vec{\omega}$ , для описания эволюции углового момента мы вводим фиктивное поле  $\vec{B}_f = -\vec{\omega}/\gamma$ , как предлагалось в подсказке. Полное эффективное мгновенное поле, которое видит атом, таким образом, равно  $\vec{B}_{\text{tot}} + \vec{B}_f$ .

Заметим теперь, что во время столкновений атомов со стенками, когда  $\vec{B}_{\text{tot}}$  не меняется, фиктивное поле  $\vec{B}_f$  испытывает скачок и по направлению, и по величине. Это происходит вследствие того, что скорость атома меняется и, следовательно, меняется и  $\vec{\omega}$ .

Наша задача теперь сводится к нахождению вероятности переворота углового момента, ориентированного по направлению основного магнитного поля с величиной  $\approx B_0$ , в присутствии флуктуирующего поперечного магнитного поля  $B_\perp$  с характерной величиной

$$B_\perp \sim \frac{\Delta B}{\gamma B_0} \frac{v}{R} \quad (2.125)$$

и характерным временем корреляции  $R/v$ <sup>1)</sup>. Отметим, что  $B_{\perp}$  много меньше  $B_0$ .

Эта задача может быть решена путем перехода в систему координат, вращающуюся таким образом, что «основное поле»  $\vec{B}_{\text{tot}}$  обращается в ноль. В такой вращающейся системе координат (мы пока пренебрегаем поперечным полем) магнитные подуровни оказываются вырожденными. Флуктуирующее поперечное поле  $B_{\perp}$  при этом вращается на ларморовой частоте  $\Omega_L = \gamma B_{\text{tot}} \approx \gamma B_0$  вокруг направления основного поля.

Для анализа переходов между этими двумя зеемановскими подуровнями мы можем использовать другой прием, связанный с переходом к новому базису. Пусть ось квантования первоначально направлена вдоль координатной оси  $\hat{z}$ , которая ориентирована по основному полю  $\vec{B}_{\text{tot}}$ , а все атомы находятся в состоянии  $|+\rangle_z$ , где индекс  $z$  обозначает направление оси квантования. Флуктуирующее магнитное поле вращается в плоскости  $xy$ . Если мы повернем ось квантования на угол  $\pi/2$ , так что она окажется направленной, например, вдоль оси  $y$ , тогда окажется, что атомы находятся в суперпозиции зеемановских состояний, поскольку

$$|+\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_y + |-\rangle_y). \quad (2.126)$$

Пустой зеемановский подуровень в этом новом базисе будет описываться состоянием

$$|-\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_y - |-\rangle_y). \quad (2.127)$$

Выражения (2.126) и (2.127) показывают, что переворот углового момента в  $z$ -базисе соответствует относительному фазовому сдвигу, равному  $\pi$  (т. е.  $\sim 1$ ), между зеемановскими подуровнями в  $y$ -базисе.

Флуктуирующее поле  $B_{\perp}$  вызывает быстрые (на частоте  $\approx \Omega_L$ ) изменения относительной фазы зеемановских подуровней с малой амплитудой  $\gamma B_{\perp}/\Omega_L \approx B_{\perp}/B_0$ . Когда атом сталкивается со стенкой, он приобретает случайный фазовый сдвиг того же порядка величины.

Случайные фазовые сдвиги, связанные с последовательными столкновениями атомов со стенками, соответствуют случайным блужданиям атома. В конце концов, после  $\approx (B_{\perp}/B_0)^{-2}$  шагов случайных блужданий накопленная фаза достигнет значения  $\sim 1$ , соответствующего значительной вероятности переворота углового момента. Поскольку на каждый шаг случайного блуждания уходит время  $\sim R/v$ , мы окончательно получаем

$$\frac{1}{T_1} \sim \left( \frac{\Delta B}{\gamma B_0^2} \frac{v}{R} \right)^2 \frac{v}{R} \sim \frac{\gamma^2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{B})^2}{\Omega_L^4} \left( \frac{v^3}{R} \right). \quad (2.128)$$

Этот процесс непосредственно связан с уширением спектральных линий вследствие диффузии фазы (см. ниже в задаче 5.2). Заметим, что если бы атомы были неподвижны ( $v = 0$ ) то согласно формуле (2.128), продольной релаксации не было бы вовсе. Атомы бы оставались поляризованными вдоль локального поля  $\vec{B}_0 + \Delta \vec{B}$ ,

<sup>1)</sup> Читатель может спросить, приведет ли к продольной релаксации движение атома через меняющееся магнитное поле в кювете без учета столкновений со стенками (представим себе ячейку огромного размера). Ответ будет отрицательным. Это происходит оттого, что атом видит поле, меняющееся адиабатически, поэтому атомная поляризация следует за направлением локального поля. Вся релаксация в рассматриваемой задаче является результатом неадиабатических изменений эффективного поля, связанных со столкновениями со стенками.

и градиенты поля не меняли бы населенностей зеемановских подуровней. Однако осциллирующее «фиктивное» поле приводит к неадиабатическим изменениям локального поля, действующего на атомы, способного, как мы видели, индуцировать переходы между зеемановскими подуровнями.

**(6)** В этом случае период ларморовой прецессии значительно превышает временной интервал между последовательными столкновениями со стенками, поэтому атомная поляризация не может адиабатически следовать за локальным магнитным полем в процессе перемещения атома по кювете<sup>1)</sup>. В результате поперечное поле  $\Delta B$  не подавляется (сравни с выражением (2.125)).

Можно перейти к системе координат, вращающейся с частотой  $\Omega_L = \gamma B_0$ , на которой основное поле  $\vec{B}_0$  обращается в ноль (см. задачу 2.6). Опять же, два магнитных подуровня в этом базисе (с осью квантования вдоль  $\vec{B}_0$ ) — вырождены. В этой системе координат поперечное магнитное поле с амплитудой  $\Delta B$  флуктуирует с характерным временем корреляции  $R/v$ . Как и в п. (а), процесс переброса проекции углового момента можно описать в терминах случайных блужданий: в этом случае требуется  $\approx (\gamma \Delta B R/v)^2$  шагов случайных блужданий, чтобы набрать достаточную вероятность перехода на другой зеемановский подуровень. Каждый шаг, как и раньше, требует времени  $R/v$ , и мы получаем

$$\boxed{\frac{1}{T_1} \approx \frac{R}{v} (\gamma \Delta B)^2.} \quad (2.129)$$

Этот процесс можно понять и не переходя во вращающуюся систему координат. Компоненты поперечного магнитного поля  $\Delta B$  вызывают переходы между зеемановскими подуровнями  $M = \pm 1/2$  (где ось квантования выбрана вдоль  $B_0$ ) и зеемановские подуровни разнесены по энергии на  $\gamma B_0$ . Атомы, летающие по кювете, «видят» быстро меняющееся поперечное магнитное поле. Поскольку  $v/R \gg \gamma B_0$ , частотный спектр этого быстро меняющегося поля значительно шире расстояния между уровнями  $\gamma B_0$ . Если ширины зеемановских подуровней  $\Gamma \approx 1/T_1$ , то легко видеть, что, поскольку  $v/R \gg \Gamma$ , только малая доля  $\Gamma R/v$  мощности меняющегося поперечного поля имеет частоту, способную индуцировать переходы между уровнями.

Итак, мы устанавливаем величину  $1/T_1$  равной скорости перехода (которая дается формулой (3.158) из задачи 3.7 с заменой  $d\mathcal{E}_0$  на  $\gamma \Delta B$ ):

$$\boxed{\frac{1}{T_1} \sim \frac{\gamma^2 \Delta B^2}{\Gamma} \frac{\Gamma}{(v/R)} \sim \frac{R}{v} (\gamma \Delta B)^2.} \quad (2.130)$$

Отметим противоположный характер зависимости от времени пролета  $R/v$ , даваемый формулами (2.128) и (2.129). В противоположность случаю, рассмотренному в п. (а), где  $\Omega_L R/v \gg 1$  и атомная поляризация следует за локальным полем, здесь движение атомов фактически снижает скорость продольной релаксации. Это — результат *кинетического усреднения* градиентов магнитного поля, эффект, анало-

<sup>1)</sup> Это можно понять следующим образом. Для того чтобы адиабатически следовать за локальным магнитным полем, атомная поляризация должна осциллировать достаточно быстро, чтобы поперечные компоненты при усреднении занулились. Поскольку атомная поляризация прецессирует между двумя столкновениями лишь на малый угол  $\approx \gamma B_0 R/v$ , поперечные компоненты поляризации в результате усреднения не пропадают.

гичный эффекту сужения Дике (задача 5.3). Отметим также, что  $T_1$  в этом случае не зависит от величины основного магнитного поля  $B_0$ .

Такой режим спиновой релаксации, обусловленной быстро флуктуирующими компонентами магнитного поля, важен в экспериментах с манипуляциями холодными атомами, движущимися вблизи поверхностей микрочипов [Henkel и др. (2003)]. В таких экспериментах флуктуирующие поля возникают благодаря тепловым токам в проводниках (см. задачу 8.16), и перевороты спинов, индуцированные этим эффектом, позволяют поляризованным атомам выскальзывать из потенциала ловушки.

(в) В присутствии достаточно плотного буферного газа скорость поляризованного атома меняется в соответствии с пространственным масштабом длины свободного пробега  $\lambda$ . Масштаб изменения компонент поперечного магнитного поля на длинах порядка  $\lambda$  равен  $\Delta B \lambda / R \sim \vec{\nabla} \cdot \vec{B} \lambda$ . В результате, мы можем написать выражения, аналогичные (2.128) и (2.129):

$$\frac{1}{T_1} \sim \frac{\gamma^2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{B})^2}{\Omega_L^4} \left( \frac{v^3}{\lambda} \right) \quad \Omega_L \lambda / v \gg 1, \quad (2.131)$$

$$\frac{1}{T_1} \sim \frac{\lambda^3}{v} (\gamma \vec{\nabla} \cdot \vec{B})^2 \quad \Omega_L \lambda / v \ll 1. \quad (2.132)$$

Эти результаты, в определенных приближениях, были получены в работах [Gamblin и Carver (1965), Schearer и Walters (1965)] и [Cates и др. (1988)].

(г) Пусть в ячейке находятся два атома, первоначально имеющие одинаковую поляризацию. Если бы атомы были неподвижными, и один из них находился в той половине кюветы, где поле равно  $B_0 + \Delta B$ , а другой атом — в той половине, где поле равно  $B_0 - \Delta B$ , дефазировка двух атомов наступила бы, когда накопленная разность фаз достигла бы величины

$$2\gamma \Delta B T_2 \sim 1. \quad (2.133)$$

Однако поскольку атомы двигаются по кювете, поле эффективно усредняется по траектории их движения, и разница между средним магнитным полем, действующим на один атом, и магнитным полем, действующим на другой атом, растет только благодаря случайной природе их траекторий в кювете:

$$\Delta B_{\text{avg}} \sim \frac{\Delta B}{\sqrt{N}}, \quad (2.134)$$

где  $N$  — среднее число отскоков, после которого происходит расфазировка атомов. Следовательно, выражение (2.133) заменяется на выражение

$$\frac{2\gamma \Delta B T_2}{\sqrt{N}} \sim 1. \quad (2.135)$$

Теперь  $N$  определяется отношением времени фазовой релаксации  $T_2$  ко времени пролета  $\sim R/v$ :

$$N \sim \frac{v}{R} T_2. \quad (2.136)$$

Таким образом, из уравнений (2.135) и (2.136) мы имеем

$$\frac{1}{T_2} \sim \frac{2\gamma \Delta B}{\sqrt{v T_2 / R}}, \quad (2.137)$$

откуда находим, что

$$\boxed{\frac{1}{T_2} \sim \frac{R}{v} (2\gamma\Delta B)^2.} \quad (2.138)$$

Отметим, что  $T_2$  для этого случая фактически совпадает с  $T_1$  в п. (б) (см. (2.129)), и это не случайно. В обоих случаях можно перейти к системе координат, вращающейся на частоте  $\gamma B_0$ , в которой основное поле обращается в ноль (см. задачу 2.6). В отсутствие основного поля пропадает различие между  $T_2$  и  $T_1$ , и становится ясным, что случаи, рассмотренные в пп. (б) и (г) этой задачи, являются идентичными.

Заметим попутно, что проблема релаксации и дефазировки элементарных единиц квантовой информации — *кубитов* — является одной из наиболее важных в области квантовых вычислений. Суть этих проблем может быть понята из обсуждения, представленного в данной задаче. Хотя мы рассмотрели случай, когда спины (т.е. кубиты) двигаются в неоднородном поле, эта ситуация аналогична случаю неподвижных кубитов, подвергаемых действию поля, флуктуирующему во времени. Эти флуктуирующие поля приводят к декогеренции состояния кубита в виде затухания диагональных ( $T_1$ ) или недиагональных ( $T_2$ ) элементов матрицы плотности (Приложение G), описывающих кубит.

## 2.9. Эффект $\vec{E} \times \vec{v}$ в газовых кюветах

Рассмотрим атомы с полным угловым моментом  $F = 1/2$ , помещенные в газовую ячейку. Однородное магнитное поле  $\vec{B}_0$ , приложенное к системе, соответствует ларморовой частоте  $\Omega_L$ . Оценить сдвиг  $\Omega_L$ , возникающий из-за наличия магнитного поля, обусловленного движением атомов, когда к кювете приложено электрическое поле  $\vec{E}$ , параллельное магнитному полю  $\vec{B}_0$ .

Эта задача является принципиально важной в экспериментах по поиску постоянного электрического дипольного момента (ЭДМ) атомов и нейтронов. Эти вопросы обсуждаются, в частности в книге [Khriplovich и Lamoreaux (1997), раздел 3.5.3]. Элементарная частица, атом или молекула, могут обладать ЭДМ только тогда, когда одновременно нарушаются и инвариантность по четности (P), и время-инверсионная инвариантность (T) (см. задачи 1.13) и 4.8.

### Подсказка

На самом деле следует рассмотреть два режима: (1) случай, когда  $\Omega_L$  много больше, чем частота *меняющихся скорость столкновений* (либо со стенками ячейки, либо с молекулами буферного газа), и (2) случай, когда  $\Omega_L$  много меньше частоты *изменяющихся скорость столкновений*.

### Решение

Атом,двигающийся со скоростью  $\vec{v}$  «видит» эффективное магнитное поле, которое является векторной суммой поля  $\vec{B}_0$  и *кинетического* (или  $\vec{E} \times \vec{v}$ ) магнитного поля:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \frac{\vec{E} \times \vec{v}}{c}. \quad (2.139)$$

Величина кинетического магнитного поля, усредненного по ансамблю атомов, содержащихся в ячейке, равна нулю, поскольку  $\langle \vec{v} \rangle = 0$ . С другой стороны, кинетическое



магнитное поле дает ненулевой вклад в среднеквадратичную величину магнитного поля  $\vec{B}$ :

$$B^2 \approx B_0^2 + \left(\frac{E\bar{v}}{c}\right)^2, \quad (2.140)$$

$$B \approx B_0 \sqrt{1 + \frac{E^2 \bar{v}^2}{c^2 B_0^2}} \approx B_0 + \frac{E^2 \bar{v}^2}{2B_0 c^2}, \quad (2.141)$$

где  $\bar{v}$  — характерная скорость теплового движения. Мы также учли, что  $B_0 \gg E\bar{v}/c$ . Таким образом мы получаем

$$\Delta B_{\text{rms}} \sim \frac{(E\bar{v}/c)^2}{B_0}. \quad (2.142)$$

На первый взгляд может показаться, что средний частотный сдвиг, связанный с кинетическим полем дается выражением

$$\Delta\Omega_L = \gamma \Delta B_{\text{rms}} \sim \gamma \frac{(E\bar{v}/c)^2}{B_0}, \quad (2.143)$$

где  $\gamma$  — гиромагнитное отношение рассматриваемых атомов (которое может быть либо порядка магнетона Бора, либо порядка ядерного магнетона, в зависимости от того, являются ли атомы парамагнитными или диамагнитными).

Однако, оказывается, что уравнение (2.143) справедливо только когда  $\Omega_L \tau_c \gg 1$ , где  $\tau_c$  — средний интервал времени между столкновениями, меняющими скорость атома. Оценим теперь  $\Delta\Omega_L$  в противоположном предельном случае, когда  $\Omega_L \tau_c \ll \ll 1$ , т.е. скорость атома меняется на временах, много короче периода ларморовой прецессии в магнитном поле  $\vec{B}_0$ .

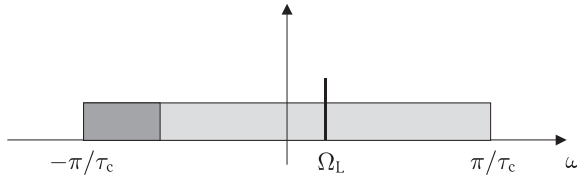


Рис. 2.7. Модель спектра, создаваемого флуктуирующим магнитным полем  $\vec{E} \times \vec{v}$ . Спектральные компоненты с частотами  $\Omega_L + \omega$  полностью компенсируют влияние компонент с частотами  $\Omega_L - \omega$ . Остаточная «нескомпенсированная» часть спектра (более затененный участок) обеспечивает динамический эффект Зеемана

Кинетическое поле представляется атому как случайным образом меняющееся поперечное (поскольку  $\vec{E} \parallel \vec{B}_0$ ) магнитное поле с характерным временным интервалом между последовательными актами изменениями  $\tau_c$ . Спектр такого поля имеет характерную ширину  $2\pi/\tau_c$ . Мы моделируем такой спектр плоским распределением мощности (см. рис. 2.7) в диапазоне частот от  $\omega = -\pi/\tau_c$  до  $\omega = \pi/\tau_c$ . Динамический эффект Зеемана имеет одну и ту же величину при заданной отстройке  $|\Omega_L - \omega|$ , но противоположные знаки для спектральных компонент с частотами  $\omega < \Omega_L$  и  $\omega > \Omega_L$  (см. задачу 2.7, формулы (2.102) и (2.103)). Спектральное распределение кинетического поля симметрично по отношению к нулевой частоте  $\omega = 0$ , а не  $\omega = \Omega_L$ , поэтому оно вызывает динамические зеемановские сдвиги между двумя подуров-

ниями, связанные с «некомпенсированной» частью спектра, показанной на рис. 2.7. Нескомпенсированная часть спектра содержит в себе долю полной мощности всего спектра, определяемую фактором  $\sim 2\Omega_L/(2\pi/\tau_c)$ . В этом случае динамический эффект Зеемана можно оценить по квадрату эффективного зеемановского сдвига, связанного с некомпенсированным полем, и по эффективной отстройке  $(\pi/\tau_c)$ , пользуясь результатами задачи 2.7:

$$\Delta\Omega_L \sim \frac{(\gamma E\bar{v}/c)^2}{\pi/\tau_c} \cdot \frac{\Omega_L}{\pi/\tau_c} = \frac{(\gamma E\bar{v}/c)^2 \tau_c^2}{\pi^2} \cdot \gamma B_0. \quad (2.144)$$

Более точные расчеты, основанные на использовании формализма матрицы плотности (Приложение G), дают результат, отличающийся от полученного нами (формула (2.144)) на множитель  $\pi^2/9$ , см. [Khrplovich и Lamoreaux (1997)].

Заметим, что знак сдвига один и тот же для двух предельных случаев. Следует также обратить внимание на противоположную зависимость от  $B_0$  в формулах (2.143) и (2.144). В пределе  $\Omega_L\tau_c \ll 1$  формула (2.144) предполагает, что сдвиг  $\vec{E} \times \vec{v}$  может быть уменьшен, например, путем использования буферного газа для снижения  $\tau_c$ .

## 2.10. Полевая ионизация водорода

Если к атому в направлении  $\hat{z}$  приложено электрическое поле  $\vec{\mathcal{E}}$ , потенциальная энергия электрона при  $z \rightarrow \infty$  принимает бесконечно большие отрицательные значения. Электрон может туннелировать через образовавшийся потенциальный барьер. Этот процесс носит название *полевой ионизации*. Вероятность  $W$  полевой ионизации основного состояния водорода в единицу времени приведена, например, в разделе 77 Landau и Lifshitz (1977)

$$W = \frac{4m_e^3 e^9}{\varepsilon \hbar^7} \exp\left(-\frac{2m_e^2 e^5}{3\varepsilon \hbar^4}\right). \quad (2.145)$$

Исходя из этого выражения, выписать формулу для вероятности полевой ионизации водородоподобного иона с ядерным зарядом  $Z$ .

Полевая ионизация может быть серьезной проблемой в экспериментах с многозарядными ионами в накопительных ускорителях (см., например, работу [Zolotarev и Budker (1997)] и ссылки в ней).

### Решение

Чтобы получить искомую зависимость от  $Z$ , можно обратить внимание на то, что нерелятивистский гамильтониан  $H$ ,

$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} + e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}, \quad (2.146)$$

для водородоподобного иона приводится к гамильтониану для атома водорода путем замены

$$e = \frac{e'}{\sqrt{Z}} \quad (2.147)$$

и

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}'\sqrt{Z}. \quad (2.148)$$

Следовательно, вероятность полевой ионизации для иона дается формулой

$$W = \frac{4m_e^3 e^9 Z^5}{\mathcal{E} \hbar^7} \exp\left(-\frac{2m_e^2 e^5 Z^3}{3\mathcal{E} \hbar^4}\right). \quad (2.149)$$

## 2.11. Индуцированные электрическим полем сдвиги зеемановских подуровней

Пусть атомы с угловым моментом  $F = 1$  помещены в достаточно сильное магнитное поле, так что их магнитные подуровни оказались хорошо разнесенными. Найти дополнительные сдвиги зеемановских подуровней, возникающие под действием слабого электрического поля  $\vec{\mathcal{E}}$ , приложенного под углом  $\theta$  к магнитному полю. Мы пренебрегаем эффектом *скалярной поляризуемости*  $\alpha$ , сдвигающей все подуровни на одну и ту же величину, но принимаем во внимание эффект *тензорной поляризуемости* ( $\alpha_2$ ), которая в системе координат с осью  $z$ , направленной вдоль вектора электрического поля, описывается диагональным гамильтонианом:

$$H(M) = -\alpha_2 \frac{\mathcal{E}^2}{2} \frac{3M^2 - F(F+1)}{F(2F-1)} = C[3M^2 - F(F+1)]. \quad (2.150)$$

### Решение

Естественной осью квантования для этой задачи является направление магнитного поля. Преобразуя гамильтониан (2.150) к этой системе координат с помощью матрицы вращения для  $F = 1$  (Приложение Е):

$$\mathcal{D}(0, \beta, 0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}, \quad (2.151)$$

получаем:

$$H' = \mathcal{D}(0, \theta, 0) H \mathcal{D}^{-1}(0, \theta, 0) = \quad (2.152)$$

$$= C \begin{pmatrix} \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} & -\frac{3 \sin \theta \cos \theta}{\sqrt{2}} & \frac{3(1 - \cos^2 \theta)}{2} \\ -\frac{3 \sin \theta \cos \theta}{\sqrt{2}} & -(3 \cos^2 \theta - 1) & \frac{3 \sin \theta \cos \theta}{\sqrt{2}} \\ \frac{3(1 - \cos^2 \theta)}{2} & \frac{3 \sin \theta \cos \theta}{\sqrt{2}} & \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.153)$$

Поскольку электрическое поле предполагается слабым, мы можем пренебречь влиянием недиагональных матричных элементов в (2.153), которые не вносят вклада в сдвиги уровней энергии в первом порядке теории возмущений по электрическому

полю ( $\propto \mathcal{E}^2$ ), когда дополнительные индуцированные электрическим полем сдвиги даются диагональными матричными элементами в (2.153).

Заметим, что результат решения этой задачи справедлив как для статического, так и для осциллирующего электрического поля (см. задачу 2.7). Кроме того, зависимость сдвига каждого зеемановского подуровня от угла  $\theta$  описывается полиномом Лежандра

$$P_2(\theta) = \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2}. \quad (2.154)$$

Заметим, что сдвиги пропадают, когда электрическое поле направлено под «магическим углом» (см. задачу 9.4) к магнитному полю.

Оказывается, что этот результат не ограничивается случаем  $F = 1$ . Для произвольного  $F$ , сдвиг  $\Delta E(M)$  зеемановского подуровня  $M$  пропорционален (см., например, [Happer (1971)])

$$\Delta E(M) \propto \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} [3M^2 - F(F+1)]. \quad (2.155)$$

Этот общий результат можно понять следующим образом. Замечая, что штарковские сдвиги зависят квадратичным образом от приложенного электрического поля  $\mathcal{E}$ , мы можем представить тензорные сдвиги как свертку тензора второго ранга  $\alpha_{ik}$  с тензором второго ранга, образованного компонентами электрического поля  $\mathcal{E}_i \mathcal{E}_k$ . Тензор поляризуемости  $\alpha_{ik}$  должен быть пропорциональным неприводимому тензору второго ранга, образованному из атомных угловых моментов (поскольку в задаче нет никаких других векторов, которые можно использовать для описания атомной системы). Следовательно, в соответствии с (F.42) из Приложения F, мы имеем

$$\alpha_{ik} \propto F_i F_k - \frac{1}{3} F^2 \rightarrow M^2 - \frac{1}{3} F(F+1), \quad (2.156)$$

где мы использовали тот факт, что благодаря присутствию сильного магнитного поля  $\vec{B}$ , компоненты  $\vec{F}$ , не параллельные  $\vec{B}$ , зануляются при усреднении.

Аналогичным образом зануляются при усреднении компоненты  $\vec{\mathcal{E}}$ , не параллельные  $\vec{B}$ , и эффективное электрическое поле, которое «видят» атомы, равно  $\mathcal{E} \cos \theta$ . Отсюда следует, что энергетический сдвиг должен быть пропорционален  $\cos^2 \theta$ . Соотношение (2.155) получается путем вычитания среднего сдвига уровней для того, чтобы отделить тензорный сдвиг от скалярного.

## 2.12. Геометрическая фаза (фаза Берри)

Рассмотрим атом в электрическом или магнитном поле, направление которого меняется во времени, возвращаясь через некоторый промежуток времени в свое исходное состояние. Может показаться, что, если первоначально атом находился в собственном состоянии  $\psi(0)$ , то после интервала  $t$ , когда поле возвращается к своему первоначальному направлению, волновая функция  $\psi(t)$  будет описываться выражением

$$\psi(t) = \psi(0) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E(t') dt' \right), \quad (2.157)$$

где  $E(t)$  — энергия собственного состояния как функция времени. Тем самым, волновая функция атома может отличаться от волновой функции в уравнении (1.157) (даже в адиабатическом приближении, т.е. когда направление поля меняется медленно) на фазовый множитель  $e^{i\alpha}$ , где  $\alpha$  — *геометрическая фаза* или *фаза Берри* [Berry (1984)].

Геометрическая фаза — это осложняющий систематический эффект [Commins (1991)] применительно к экспериментам по поиску постоянного дипольного момента (см. задачу 4.8), и представляющий определенный самостоятельный интерес (см., например, [Bouchiat (1989)]).

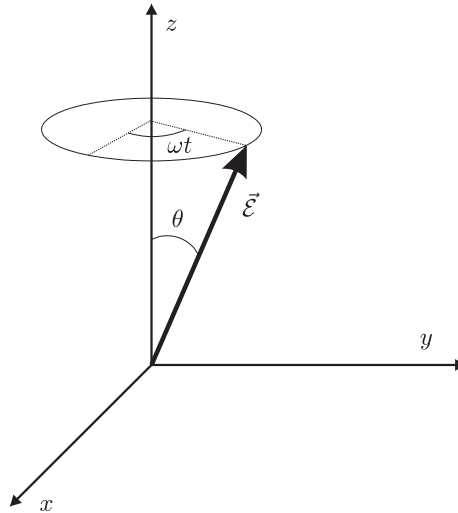


Рис. 2.8. Геометрия, использованная для демонстрации геометрической фазы. Электрическое поле  $\vec{E}$  вращается с частотой  $\omega$  вокруг оси  $Z$

Рассмотрим атом в состоянии  $J = 1$ , помещенный в электрическое поле  $\vec{E}(t)$ , вращающееся вокруг оси  $z$  (рис. 2.8). Хотя точная траектория и временная эволюция конца вектора электрического поля не существенны (результат зависит только от телесного угла, «заметаемого» вектором электрического поля), для упрощения расчетов мы предположим, что

$$\vec{E}(t) = E_0(\sin \theta \cos \omega t \hat{x} + \sin \theta \sin \omega t \hat{y} + \cos \theta \hat{z}). \quad (2.158)$$

Найти геометрическую фазу, приобретаемую после одного полного оборота вектора электрического поля ( $\omega t = 2\pi$ ). Принять, что поле вращается медленно (т.е.  $\omega \ll \Delta/\hbar$ , где  $\Delta$  — характерно энергетическое расщепление зеемановских подуровней вследствие эффекта Штарка).

### Подсказка

Следуя методу, примененному в работе [Commins (1991)], введем «мгновенные» базисные состояния, соответствующие зеемановским подуровням  $M = 0, \pm 1$ , с осью квантования, направленной вдоль электрического поля  $\vec{E}$ . Эти состояния могут быть

получены путем преобразования поворота исходных состояний относительно оси квантования, направленной вдоль оси  $z$ .

Мы можем выписать матрицу вращения для углов Эйлера ( $\omega t$ ,  $\theta$  и 0):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\omega t, \theta, 0) &= \mathcal{D}(\omega t, 0, 0) \cdot \mathcal{D}(0, \theta, 0) = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\omega t} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\omega t} & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{i\omega t} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\omega t} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\omega t} & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{-i\omega t} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.159)$$

В матрице (2.159) индексы соответствуют компонентам  $M$ , как обычно, в порядке понижения (см. Приложение Е). Таким образом, три мгновенных базисных состояния имеют вид

$$\psi_1(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\omega t} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\omega t} \end{pmatrix}, \quad (2.160)$$

$$\psi_0(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\omega t} \\ \cos \theta \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\omega t} \end{pmatrix}, \quad (2.161)$$

$$\psi_{-1}(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{i\omega t} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{-i\omega t} \end{pmatrix}. \quad (2.162)$$

### Решение

В мгновенном базисе (выражения (2.160)–(2.162)) из уравнений Шрёдингера мы получаем

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n(t), \quad (2.163)$$

где  $E_n$  — энергии состояний. Состояния расщепляются вследствие квадратичного эффекта Штарка, и, для упрощения расчетов, мы выберем ноль энергии таким образом, что

$$E_{\pm 1} = 0, \quad (2.164)$$

$$E_0 = -\Delta. \quad (2.165)$$

Произвольная волновая функция  $\Psi(t)$  может быть разложена по мгновенным базисным состояниям

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(t), \quad (2.166)$$

где  $c_n$  — зависящие от времени коэффициенты проектирования, и мы явно выделили фазовый множитель  $e^{-iE_n t/\hbar}$ , возникший благодаря эволюции базисных состояний в соответствии с уравнением Шрёдингера (2.163).

Дифференцируя по времени выражение (2.166) для  $\Psi(t)$ , мы находим

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \left( \frac{\partial c_n}{\partial t} \psi_n(t) - i \frac{E_n}{\hbar} c_n(t) \psi_n(t) + c_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right). \quad (2.167)$$

Мы можем также определить временную производную  $\Psi(t)$  из уравнения (2.163):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t) E_n \psi_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (2.168)$$

Комбинируя выражения (2.167) и (2.168), приходим к соотношению

$$\sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \left( \frac{\partial c_n}{\partial t} \psi_n(t) + c_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right) = 0. \quad (2.169)$$

Теперь умножим выражение (2.169) на  $\psi_m^\dagger(t)$  и воспользуемся тем фактом, что  $\psi_m^\dagger(t) \psi_n(t) = \delta_{mn}$ , где  $\delta_{mn}$  — символ Кронекера:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = - \sum_n e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} c_n(t) \psi_m^\dagger(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t}. \quad (2.170)$$

Поскольку нас интересует случай медленно вращающегося электрического поля ( $\omega \ll \Delta/\hbar$ ), то мы можем пренебречь быстро осциллирующими членами в (2.170). Таким образом, мы должны рассматривать только вырожденные состояния. Воспользуемся теперь явной формой волновых функций мгновенного базиса (выражения (2.160)–(2.162)) чтобы оценить величины  $\psi_m^\dagger(t) \psi_n$ :

$$\psi_1^\dagger \dot{\psi}_1 = \frac{i\omega}{4} (1 + \cos \theta)^2 - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos \theta)^2 = i\omega \cos \theta, \quad (2.171)$$

$$\psi_1^\dagger \dot{\psi}_{-1} = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) = 0, \quad (2.172)$$

$$\psi_{-1}^\dagger \dot{\psi}_1 = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) = 0, \quad (2.173)$$

$$\psi_0^\dagger \dot{\psi}_0 = \frac{i\omega}{2} \sin^2 \theta - \frac{i\omega}{2} \sin^2 \theta = 0, \quad (2.174)$$

$$\psi_{-1}^\dagger \dot{\psi}_{-1} = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos \theta)^2 - \frac{i\omega}{4} (1 + \cos \theta)^2 = -i\omega \cos \theta. \quad (2.175)$$

Подставляя результаты [(2.171)–(2.175)] в (2.170), мы получаем

$$\frac{\partial c_{\pm 1}}{\partial t} = \mp i\omega \cos \theta c_{\pm 1}(t), \quad (2.176)$$

что дает

$$c_{\pm 1}(t) = c_{\pm 1}(0) e^{\mp i\omega t \cos \theta}. \quad (2.177)$$

Из выражения (2.177) видно, что действительно для  $\omega t = 2\pi$  коэффициенты  $c_{\pm 1}(2\pi/\omega)$  отличаются от  $c_{\pm 1}(0)$  множителем геометрической фазы

$$c_{\pm 1}(2\pi/\omega) = c_{\pm 1}(0)e^{\mp i2\pi \cos \theta} = c_{\pm 1}(0)e^{\mp i2\pi(\cos \theta - 1)}, \quad (2.178)$$

или, иначе,

$$\boxed{c_{\pm 1}(2\pi/\omega) = c_{\pm 1}(0)e^{\mp i\Omega}}, \quad (2.179)$$

где  $\Omega$  — телесный угол, заметаемый вектором электрического поля.

Заметим, что этот результат идентичен полученному для медленно меняющегося магнитного поля. Как было отмечено выше, результат не зависит от траектории вектора поля. Обобщение на состояние с полным угловым моментом  $F$  и  $z$ -проекцией  $M$  дает для фазы Берри выражение

$$\alpha_M = -M\Omega. \quad (2.180)$$

Существуют также прямые классические аналогии этого явления (например для вращения твердых тел), которые использовались в работах [Hannay (1985)] и [Montgomery (1991)].



## Глава 3

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ СО СВЕТОМ

### 3.1. Двухуровневая система в условиях периодического возмущения (У)

В этой задаче мы рассматриваем систему (например, атом) с двумя невырожденными уровнями энергии, подвергаемую периодическому возмущению, которое связывает эти два состояния. Наша цель — описать временную эволюцию системы, предполагая, что первоначально она находится в нижнем состоянии и что нижнее состояние не способно распадаться. Верхнее состояние распадается на другие состояния со скоростью  $\Gamma$ . Это — одна из центральных проблем атомной и оптической физики (этим вопросам посвящены целые книги, см., например, [Allen и Eberly (1987)]), возникающих во множестве ситуаций, как будет видно из дальнейших задач. Заметим, что содержание этой задачи тесно связано с явлением магнитного резонанса (задача 2.6) и с обсуждением динамических эффектов Штарка и Зеемана в задаче (2.7).

**(а)** Написать дифференциальные уравнения для зависящих от времени амплитуд вероятности обнаружить систему в верхнем состоянии  $b(t)$  и в нижнем состоянии  $a(t)$ . Принять следующую форму периодического возмущения:

$$V(t) = V_0 e^{i\omega t}, \quad (3.1)$$

где  $V_0$  — величина вещественная.

#### Решение

Состояние системы описывается волновой функцией

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Временная эволюция системы (в пренебрежении релаксацией) может быть описана уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle, \quad (3.3)$$

где мы положили  $\hbar = 1$ . Гамильтониан имеет вид

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & V(t) \\ V^*(t) & \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

где  $\omega_0$  — энергетическое расстояние между верхним и нижним состояниями двухуровневой системы. Для гамильтониана (3.4) при форме периодического возмущения (3.1) уравнение (3.3) может быть записано в явном виде:

$$i\frac{da}{dt} = V_0 e^{i\omega t} b(t), \quad (3.5)$$

$$i\frac{db}{dt} = V_0 e^{-i\omega t} a(t) + \omega_0 b(t). \quad (3.6)$$

Для того чтобы учесть релаксацию, в правую часть уравнения (3.6) должен быть добавлен дополнительный член <sup>1)</sup>:

$$i\frac{db}{dt} = V_0 e^{-i\omega t} a(t) + (\omega_0 - i\Gamma/2)b(t). \quad (3.7)$$

Этот член обеспечивает затухание амплитуды  $b(t)$  со скоростью  $\Gamma/2$  и релаксацию населенности со скоростью  $\Gamma$ .

**(6)** Продолжим теперь решать уравнения с начальными условиями

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Для ряда предельных случаев уравнения могут быть решены аналитически.

Определить вероятность  $P(t) = |b(t)|^2$  обнаружения системы в верхнем состоянии при условии, что  $\Delta = \omega - \omega_0 = 0$  и при отсутствии релаксации ( $\Gamma = 0$ ).

Можно найти  $b(t)$  и  $a(t)$  путем использования так называемого *представления взаимодействия* с помощью унитарного преобразования. В представлении взаимодействия невозмущенные волновые функции не меняются во времени. В данном случае это полностью аналогично переходу к системе координат, вращающейся с частотой  $\omega = \omega_0$ , который использовался при анализе магнитного резонанса (задачи 2.6 и 2.7). Такое преобразование системы координат устраняет временную зависимость гамильтониана  $\mathbf{H}$  (см. уравнение (3.4)) и изменяет энергетический зазор  $\omega_0$  между состояниями на  $\omega - \omega_0$ . Следовательно, во вращающейся системе координат, в условиях резонанса, два состояния оказываются вырожденными, и гамильтониан имеет вид

$$\mathbf{H}^{(\text{rot})} = \begin{pmatrix} 0 & V_0 \\ V_0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

### Решение

Разумеется, эта задача полностью аналогична задаче 2.6 и может быть решена, если рассматривать двухуровневую систему как частицу со спином  $1/2$ , которая

<sup>1)</sup> Введение релаксации таким способом эквивалентно использованию вместо уравнения (3.4) неэрмитова гамильтониана

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & V(t) \\ V^*(t) & \omega_0 - i\Gamma/2 \end{pmatrix}.$$

Следует иметь в виду, что, хотя такой прием здесь работает, «вписывать» релаксационные члены в гамильтониан, в общем случае, не вполне корректно, и при использовании формализма матрицы плотности (см., например, Приложение G и [Stenholm (1984)]) обычно вводится отдельная матрица релаксации.

помещена в статическое магнитное поле  $\vec{B}_0$  и подвергается действию поперечного вращающегося поля  $\vec{B}_\perp(t)$ . Тогда осцилляции населенностей этой пары уровней соответствуют прецессии магнитного момента вокруг магнитного поля во вращающейся системе координат.

Здесь мы предлагаем другой метод решения. Мы можем найти собственные значения энергий матрицы (3.9) с помощью того же метода, который использовался в задаче (1.4). В результате, получаем

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Эти собственные состояния соответствуют собственным значениям

$$E_1 = -V_0, \quad (3.12)$$

$$E_2 = V_0. \quad (3.13)$$

Исходное состояние  $\psi(0)$  (уравнение (3.8)) может быть представлено в виде суперпозиции собственных состояний  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$ :

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) = \frac{1}{2} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (3.14)$$

В соответствии с зависящим от времени уравнением Шрёдингера, собственные состояния гамильтониана по мере их эволюции во времени приобретают набег фазы

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{iV_0t}|1\rangle + e^{-iV_0t}|2\rangle). \quad (3.15)$$

Поскольку верхнее состояние также может быть представлено в виде линейной суперпозиции  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$ ,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle - |1\rangle), \quad (3.16)$$

амплитуда обнаружения системы в верхнем состоянии равна

$$b(t) = \frac{1}{2} (\langle -1| - \langle 2|) (e^{iV_0t}|1\rangle + e^{-iV_0t}|2\rangle) = \quad (3.17)$$

$$= \frac{1}{2} (e^{iV_0t} + e^{-iV_0t}) = \quad (3.18)$$

$$= -i \sin(V_0t). \quad (3.19)$$

Таким образом вероятность  $P(t)$  обнаружить систему в верхнем состоянии в таких условиях дается выражением

$$\boxed{P(t) = |b(t)|^2 = \sin^2(V_0t).} \quad (3.20)$$

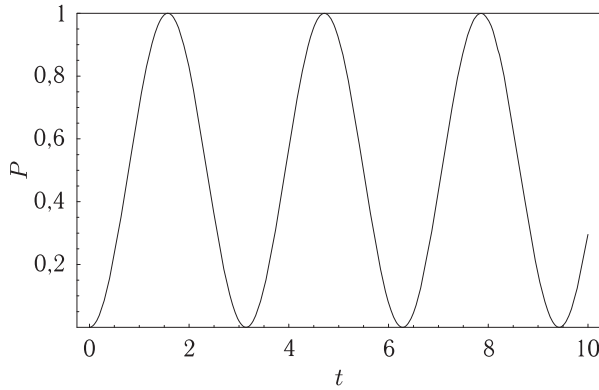


Рис. 3.1. Вероятность  $P$  обнаружения системы в верхнем состоянии. В рассмотренном случае  $\Delta = \omega - \omega_0 = 0$ ,  $\Gamma = 0$ , а сила возмущения выбрана равной  $V_0 = 1$ , что определяет масштаб по оси времени. В соответствии с уравнением (3.20) система испытывает осцилляции Раби на частоте  $2V_0$  и с максимальной амплитудой

Рисунок 3.1 показывает вероятность обнаружения системы в верхнем состоянии. Как видно из рисунка, эта вероятность осциллирует между 0 и 1 с частотой  $\Omega_R = = 2V_0$ . Эта частота называется *резонансной частотой Раби*<sup>1)</sup>.

На малых временах  $t$  вероятность обнаружения системы в верхнем состоянии растет квадратично со временем. Это — результат интерференционного эффекта. Рассмотрим бесконечно малый временной интервал  $dt$ . Квантово-механическая амплитуда обнаружения системы в верхнем состоянии зависит от  $dt$  линейно. Другой интервал длительностью  $dt$  вносит аналогичный вклад в амплитуду верхнего состояния (до тех пор, пока оно является существенно пустым и процессами вынужденных переходов системы в нижнее состояние можно пренебречь). Вклад этих двух временных интервалов, таким образом, вдвое больше по амплитуде и вчетверо по вероятности перехода, чем вклад одного интервала. Такое квадратичное поведение может быть ограничено (даже до того, как верхний уровень будет заметно заселен), если вклады в амплитуду от различных временных интервалов не фазированы. Такая дефазировка может произойти вследствие отстройки частоты возмущения от резонанса (см. п. (в)) или вследствие релаксации (п. (д)).

**(в)** Найти вероятность  $P(t) = |b(t)|^2$  обнаружения системы в верхнем состоянии при  $\Gamma = 0$  в предположении, что  $a(t) \approx 1$  (это так, например, когда частотная расстройка  $|\omega - \omega_0|$  существенно превосходит  $V_0$ ).

### Решение

Начнем с выражения

$$b(t) = \beta(t)e^{-i\omega_0 t}. \quad (3.21)$$

Мы выбираем такую форму потому, что в отсутствие возмущения выражение (3.21) при  $\beta(t) = \text{const}$  будет удовлетворять зависящему от времени уравнению Шрёдинг-

<sup>1)</sup> Заметим, что в литературе можно найти определения, отличающиеся от приведенного на числовой множитель.

гера (3.3). Таким образом все влияние возмущения описывается временной зависимостью  $\beta$ . Подставляя выражение (3.21) в дифференциальное уравнение (3.6), мы получаем

$$\frac{d\beta}{dt}e^{-i\omega_0 t} - i\omega_0\beta(t)e^{-i\omega_0 t} = -iV_0e^{-i\omega t}a(t) - i\omega_0\beta(t)e^{-i\omega_0 t}. \quad (3.22)$$

Сокращая подобные члены в обеих частях уравнения (3.22), получаем

$$\frac{d\beta}{dt} = -iV_0e^{-i\Delta t}a(t). \quad (3.23)$$

Используя предположение  $a(t) \approx 1$ , после интегрирования находим

$$\beta(t) = -iV_0 \int_0^t e^{-i\Delta t'} dt' = \quad (3.24)$$

$$= \frac{V_0}{\Delta} (e^{-i\Delta t} - 1) = \quad (3.25)$$

$$= \frac{V_0}{\Delta} e^{-i\Delta t/2} \left[ \frac{2}{i} \sin\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \right]. \quad (3.26)$$

В результате, из уравнений (3.21) и (3.26) вероятность  $P(t)$  обнаружения системы в возбужденном состоянии дается выражением

$$P(t) = |b(t)|^2 = \frac{(2V_0)^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right). \quad (3.27)$$

Вероятность  $P(t)$  обнаружения системы в верхнем состоянии представлена в виде графика на рис. 3.2. Мы выбрали  $V_0 = 1$  (поскольку  $V_0$  имеет размерность частоты, что означает также, что мы выбрали конкретную калибровку по оси времени). Легко

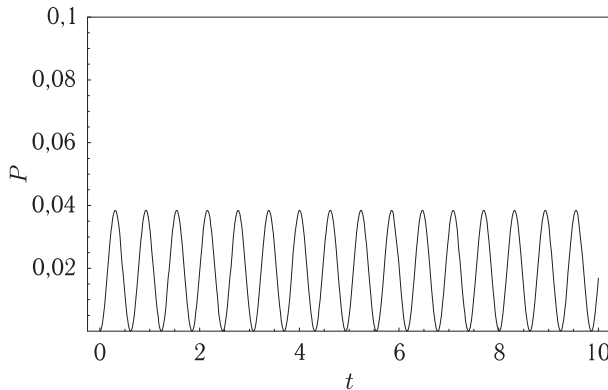


Рис. 3.2. То же, что на рис. 3.1, но при  $\Delta = 10$ . Система обнаруживает осцилляции Раби с малой амплитудой и на частоте, близкой к  $\Delta$ , в соответствии с уравнением (3.27)

видеть, что эта вероятность (или населенность верхнего состояния) осциллирует между 0 и малым значением с частотой  $\Omega_R \approx \Delta$ .

**(г)** Знание резонансного решения (3.20) и решения (3.27) в условиях сильной отстройки позволяет угадать общее решение при  $\Gamma = 0$ . Это решение также может

быть получено аналитически путем решения системы дифференциальных уравнений [(3.5) и (3.6)] без каких бы то ни было приближений (см., например, [Ramsey (1985), гл. 5]).

### Решение

Интерполируя переход между выражениями (3.27) и (3.20), получаем общее решение

$$P(t) = \frac{(2V_0)^2}{(2V_0)^2 + \Delta^2} \sin^2 \left( \frac{1}{2} [(2V_0)^2 + \Delta^2]^{1/2} t \right). \quad (3.28)$$

(д) Рассмотрим теперь влияние релаксации. Чтобы сделать наглядными различные режимы поведения системы, изобразить графически численное решение системы уравнений (3.5) и (3.7) в условиях резонанса ( $\Delta = 0$ ) при  $\Gamma = 0,3$  и  $\Gamma = 10$  (чтобы найти и изобразить графически численные решения, можно использовать программу Matematica).

### Решение

Рисунок 3.3 показывает временную зависимость при тех же параметрах, что и на рис. 3.1, но при  $\Gamma = 0,3$ .

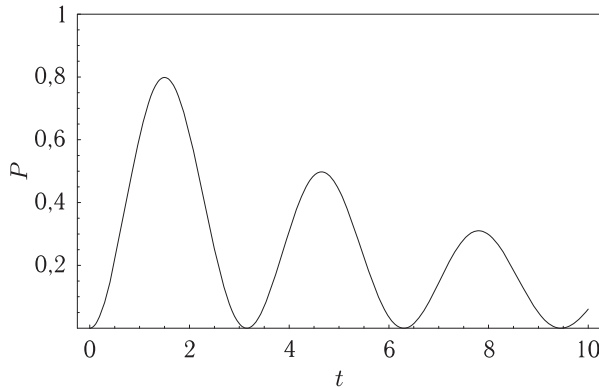


Рис. 3.3. То же, что на рис. 3.1, но при  $\Gamma = 0,3$ . Осцилляции Рэби затухают

Теперь наблюдаются осцилляции Рэби с уменьшающейся амплитудой вследствие ухода атомов на другие состояния. Такие *затухающие осцилляции* происходят при  $\Gamma < 2\Omega_R$ . При более высоких значениях  $\Gamma$  система оказывается «*переуспокоенной*», и осцилляции не наблюдаются. Это иллюстрируется на рис. 3.4, где  $\Gamma = 10$ . (Обращаем внимание на изменение масштаба по оси ординат.) В переуспокоенном режиме, на коротких временах, населенность верхнего состояния растет, как будто релаксация отсутствует, а затем проходит невысокий максимум:

$$P_{\max} \sim \left( \frac{\Omega_R}{\Gamma} \right)^2, \quad (3.29)$$

и далее релаксирует к нулю. Максимальная населенность верхнего состояния наблюдается в момент времени  $t_{\max} \sim 2\pi/\Gamma$ .

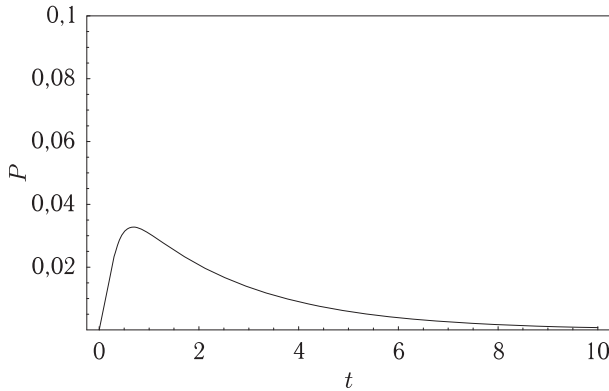


Рис. 3.4. То же, что на рис. 3.1 и 3.3, но при  $\Gamma = 10$ . Система больше не обнаруживает осциллирующего поведения («переуспокоенный» режим). Обращаем внимание на изменение масштаба по оси ординат

Решая систему связанных дифференциальных уравнений (3.6) и (3.7) (с помощью метода, аналогичного использованному при решении уравнения для незатухающей системы (3.5) и (3.6) в п. (б) этой задачи), мы получаем общее аналитическое выражение для временной зависимости населенности верхнего состояния [Demtröder (1996)]:

$$P(t) = \frac{(2V_0)^2 e^{-\Gamma t/2}}{(2V_0)^2 + \Delta^2 + \Gamma^2/4} \sin^2 \left( \frac{t}{2} \sqrt{(\Delta + \Gamma/2)^2 + (2V_0)^2} \right). \quad (3.30)$$

## 3.2. Квантование электромагнитного поля (У)

В этом разделе мы сделаем краткий обзор вопросов квантования электромагнитного поля, что позволит нам глубже понять многие важные явления, среди которых можно упомянуть спонтанное излучение (задача 3.3), шумовые свойства светового поля (задача 8.8) и *эффект Казимира* (см., например, [Lamoreaux (1997)] и ссылки в этой публикации). Детальное обсуждение этих важных вопросов можно найти во многих монографиях, например, [Heitler (1954), Sakurai (1967), Shankar (1994)], и [Loudon (2000)].

При квантовании электромагнитного поля каждой *мод*е электромагнитного поля однозначно сопоставляется простой гармонический осциллятор (ПГО). Мода определяется волновым вектором  $\vec{k}$  и поляризацией  $\hat{\epsilon}$ . Для простоты мы ограничим наше рассмотрение в этой задаче случаем одной моды. Учет всех мод потребует суммирования последующих результатов по всем возможным значениям  $\vec{k}$  (и, следовательно, по всем возможным частотам  $\omega$ ) и учета двух ортогональных поляризаций.

Рассмотрим световое поле, описываемое векторным потенциалом  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  в условиях кулоновской калибровки (когда  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ )<sup>1)</sup>. Мы предполагаем отсутствие свобод-

<sup>1)</sup> Как мы увидим в задаче 3.3, векторный потенциал оказывается полезным представлением для светового поля, когда рассматривается взаимодействие поля с атомной системой.

ных зарядов и токов, так что скалярный потенциал может считаться равным нулю. Из уравнений Максвелла находим, что  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  удовлетворяет волновому уравнению

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (3.31)$$

Напомним, что электрическое  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  и магнитное  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  поля связаны с векторным потенциалом соотношениями

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (3.32)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (3.33)$$

Чтобы увидеть, как реализуется соответствие между модой электромагнитного поля и ПГО, мы начнем с общего решения волнового уравнения (3.31) для заданной моды:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left[ C_0 \hat{\epsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + C_0^* \hat{\epsilon}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right], \quad (3.34)$$

где  $\vec{A}$  нормирован на полость с объемом  $V$  (эта *нормировка на полость* служит методом, позволяющим обойти тот факт, что плоские волны номинально имеют бесконечную протяженность и потому не могут быть нормированы, если мы не ограничиваем объем интегрирования). Вводя обозначение

$$C(t) = C_0 e^{-i\omega t}, \quad (3.35)$$

имеем

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left[ C(t) \hat{\epsilon} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + C^*(t) \hat{\epsilon}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right], \quad (3.36)$$

или

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left[ C(t) \hat{\epsilon} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \text{с.с.} \right], \quad (3.37)$$

так что вся временная эволюция содержится в  $C(t)$  (с.с. обозначает комплексное сопряжение).

**(а)** Показать, что полная энергия  $E$  светового поля дается выражением

$$E = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c^2} |C(t)|^2. \quad (3.38)$$

### Решение

Энергия светового поля вычисляется по формуле

$$E = \frac{1}{8\pi} \int_V (\mathcal{E}^2 + B^2) dV. \quad (3.39)$$



Используя уравнения (3.32) и (3.33) вместе с выражением для векторного потенциала (3.37), мы получаем для электрического и магнитного полей

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{\omega}{c\sqrt{V}} \left[ iC(t)\hat{\epsilon} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \text{с. с.} \right], \quad (3.40)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{\sqrt{V}} \left[ iC(t)(\vec{k} \times \hat{\epsilon}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \text{с. с.} \right], \quad (3.41)$$

где мы воспользовались тем фактом, что согласно определению (3.35)

$$\frac{\partial}{\partial t} C(t) = -i\omega C(t). \quad (3.42)$$

Имея в виду, что  $\hat{\epsilon}$  — комплексный вектор, получаем

$$\hat{\epsilon}^* \cdot \hat{\epsilon} = 1, \quad (3.43)$$

$$(\vec{k} \times \hat{\epsilon}^*) \cdot (\vec{k} \times \hat{\epsilon}) = k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (3.44)$$

После несложных вычислений находим, что величины, пропорциональные  $C(t)^2$  и  $C^*(t)^2$  сокращаются, когда мы складываем квадрат электрического поля с квадратом магнитного поля, и остаются четыре члена, пропорциональные  $|C(t)^2|$ . Суммируя эти члены и интегрируя по объему полости, мы получаем уравнение (3.38):

$$E = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c^2} |C(t)|^2.$$

**(6)** Рассмотрим теперь классический простой гармонический осциллятор (ПГО) с гамильтонианом вида

$$H_{sho} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2, \quad (3.45)$$

где  $q$  описывает координаты, а  $p$  — импульс частицы с массой  $m$ . Стандартный прием состоит в том, чтобы перенормировать  $q$  и  $p$  согласно выражениям

$$p = \sqrt{m\omega} P, \quad (3.46)$$

$$q = \frac{Q}{\sqrt{m\omega}}, \quad (3.47)$$

так что

$$H_{sho} = \frac{\omega}{2} (Q^2 + P^2) \quad (3.48)$$

(в результате перенормировки  $P$  и  $Q$  приобретают одинаковую размерность).

Предполагая, что  $Q = \alpha_0 \cos \omega t$ , сопоставить временные зависимости  $P$  и  $Q$  с временной зависимостью вещественной и мнимой частей  $C(t)$  (уравнение (3.35)). Сравнить также энергию  $E$  электромагнитного поля из уравнения (3.38) с гамильтонианом ПГО.

**Решение**

Начнем с соотношения между  $p$  и  $q$ :

$$p = m \frac{dq}{dt}, \quad (3.49)$$

и сделаем замену, предложенную в (3.46) и (3.47). В результате получаем

$$\omega P = \frac{dQ}{dt}. \quad (3.50)$$

Следовательно

$$Q(t) = \alpha_0 \cos \omega t, \quad (3.51)$$

$$P(t) = -\alpha_0 \sin \omega t. \quad (3.52)$$

Этот результат можно сопоставить с временной зависимостью вещественной и мнимой частей  $C(t)$

$$\operatorname{Re}[C(t)] = C_0 \cos \omega t, \quad (3.53)$$

$$\operatorname{Im}[C(t)] = -C_0 \sin \omega t. \quad (3.54)$$

Далее, сопоставим гамильтониан для ПГО

$$H_{sho} = \frac{\omega}{2} (Q^2 + P^2)$$

с энергией электромагнитного поля из уравнения (3.38)

$$E = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c^2} \left( |\operatorname{Re}[C(t)]|^2 + |\operatorname{Im}[C(t)]|^2 \right). \quad (3.55)$$

Отсюда следует, что мы можем интерпретировать вещественную и мнимую части  $C(t)$  как переменные  $P$  и  $Q$  гармонического осциллятора. Завершая эту аналогию формулой  $C(t) \propto Q + iP$  и выбирая соответствующий коэффициент пропорциональности, получаем

$$C(t) = \sqrt{\frac{\pi c^2}{\omega}} (Q + iP), \quad (3.56)$$

и для гамильтониана любой одиночной моды свободного электромагнитного поля имеем

$$H_{em} = \frac{\omega}{2} (Q^2 + P^2). \quad (3.57)$$

**(в)** Теперь, когда мы установили связь между электромагнитным полем и ПГО, мы можем приложить все свойства квантово-механического ПГО (см., например, [Griffiths (1995)] или задачу 1.2) к моде электромагнитного поля. Наше первое наблюдение состоит в том, что собственные состояния энергии квантово-механического ПГО обозначаются как  $|n\rangle$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$ , и их энергии определяются выражением

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.58)$$

Каков смысл квантового числа  $n$  применительно к моде электромагнитного поля?

### Решение

Каждый фотон несет энергию  $\hbar\omega$ , поэтому число фотонов в моде светового поля равно  $E_n/(\hbar\omega)$ . Если  $n \gg 1$ , мы имеем  $n \approx E_n/(\hbar\omega)$  и, следовательно,  $n$  соответствует числу фотонов в моде. Заметим, что даже когда в моде нет фотонов, мода содержит в себе энергию  $\hbar\omega/2$ . Это известная *энергия нулевых колебаний*. Существование энергии нулевых колебания электромагнитного поля было продемонстрировано во множестве эффектов квантовой электродинамики, включая, в частности, великолепный недавний эксперимент [Lamogeaux (1997)] по измерению так называемого *эффекта Казимира* (см. обзор [Milton (2001)]). Тем не менее, существование энергии нулевых колебаний представляется таинственным, поскольку если провести суммирование по всем возможным модам электромагнитного поля, получится бесконечная плотность энергии. Согласно общей теории относительности эта энергия должна радикальным образом влиять на эволюцию Вселенной, что не согласуется с наблюдениями. Разрешение этих вопросов, которые иногда относят к физике вакуума, составляет одну из важнейших проблем современной физики.

(**r**) В качестве последнего упражнения мы определим операторы рождения и уничтожения фотона,  $a^\dagger$  и  $a$  соответственно, которые аналогичны операторам повышения и понижения для ПГО:

$$a = \frac{Q + iP}{\sqrt{2\hbar}}, \quad (3.59)$$

$$a^\dagger = \frac{Q - iP}{\sqrt{2\hbar}}, \quad (3.60)$$

где

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (3.61)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (3.62)$$

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (3.63)$$

Кроме того

$$[Q, P] = i\hbar. \quad (3.64)$$

Выразить векторный потенциал (3.37) и гамильтониан  $H_{em}$  через операторы рождения и уничтожения.

### Решение

Согласно уравнениям (3.59) и (3.56), можно написать

$$C(t) = \sqrt{\frac{\pi c^2}{\omega}} (Q + iP) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} a. \quad (3.65)$$

Следовательно, векторный потенциал в выражении (3.37) имеет вид

$$\vec{A} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \left[ a \hat{\epsilon} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a^\dagger \hat{\epsilon}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right]. \quad (3.66)$$

Мы воспользуемся этой формой для векторного потенциала в задаче 3.3.

Чтобы выразить  $H_{em}$  через  $a$  и  $a^\dagger$ , рассмотрим соотношения

$$a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar}(Q - iP)(Q + iP) = \quad (3.67)$$

$$= \frac{1}{2\hbar}(Q^2 - iPQ + iQP + P^2) = \quad (3.68)$$

$$= \frac{1}{2\hbar}(Q^2 + i[Q, P] + P^2) = \quad (3.69)$$

$$= \frac{1}{2\hbar}(Q^2 + P^2 - \hbar), \quad (3.70)$$

откуда имеем

$$Q^2 + P^2 = \hbar(2a^\dagger a + 1). \quad (3.71)$$

Подставляя (3.71) в (3.57), получаем

$$H_{em} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \quad (3.72)$$

Отметим, что в соответствии с решением п. (в) (формула (3.58)), оператор  $a^\dagger a$  дает число фотонов соответствующей моды электромагнитного поля, и поэтому он известен как *оператор числа частиц*.

### 3.3. Испускание света атомами (У)

В этом длинном, но важном учебном разделе мы выводим формулу для спонтанного и вынужденного испускания света атомной системой в электрическом дипольном ( $E1$ ) приближении (несколько позднее мы определим более точно, что под ним подразумевается). Подход, который мы будем здесь использовать, в отличие от способов решения большинства задач этой книги, является достаточно формальным. Более интуитивные модели атомных переходов рассмотрены в задачах 2.6 и 3.1. Формальный подход нужен по той причине, что для понимания физического механизма *спонтанного излучения* требуется привлечение концепции квантованного электромагнитного поля (задача 3.2). Это влечет за собой определенный уровень математического описания. Кроме того, используемые в этом разделе математические приемы («золотое правило Ферми», теорема Вигнера–Эккарта, коэффициенты Клебша–Гордона и пр.) применяются во многих важных областях атомной спектроскопии (см., например, [Sobelman (1992)] и [Scully и Zubairy (1997)]), так что с ними полезно познакомиться.

Рассмотрим переходы между основным состоянием  $|g\rangle$  с угловым моментом  $J$  и возбужденным состоянием  $|e\rangle$  с угловым моментом  $J'$ . Зеемановские состояния будем обозначать проекциями их угловых моментов на ось квантования ( $z$ ) —  $M_J$  и  $M_{J'}$  соответственно<sup>1)</sup>. Энергетический зазор между состояниями  $|g\rangle$  и  $|e\rangle$  равен  $\hbar\omega_0$ .

<sup>1)</sup> Поскольку многие практикующие спектроскописты пользуются книгой И. И. Собельмана (1992), мы предупреждаем читателей, что в его обозначениях начальный уровень перехода всегда обозначается  $J$ , а конечный  $J'$ . В частности, в случае испускания это означает, что верхним состоянием является  $J$ , а нижним —  $J'$ , что противоположно нашим обозначениям.

Первый инструмент, которым мы воспользуемся, это *золотое правило Ферми* (см., например, [Griffiths (1995)] или [Bransden и Joachain (1989)]), первоначально сформулированное Дираком, исходя из теории возмущений, зависящих от времени (в первом порядке <sup>1)</sup>).

В соответствии с золотым правилом Ферми дифференциальная скорость перехода атома  $dW_{fi}$  из начального состояния  $|i\rangle$  в конечное  $|f\rangle$  под действием возмущения с гамильтонианом  $H'$  имеет вид

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|H'|i\rangle|^2 \rho_f(E) P(E) dE, \quad (3.73)$$

где  $\rho_f(E)$  — *плотность состояний*, т. е. число состояний  $|f\rangle$  на единичный интервал энергии, а  $P(E)$  — энергетическое распределение, допускающее такой переход (более подробно мы обсудим это ниже). В последующих расчетах мы будем использовать квантованное электромагнитное поле (задача 3.2), так что функции  $|f\rangle$  и  $|i\rangle$  включают в себя как состояние атома, так и состояние фотона. Поскольку в задаче фигурирует всего несколько атомных состояний, то  $\rho_f(E)$  это и есть плотность фотонных состояний.

**(а)** Рассчитать функцию плотности состояний  $\rho_f(E)$  для фотонов с поляризацией  $\hat{\epsilon}$  и с волновыми векторами  $\vec{k}$  в дифференциальном телесном угле  $d\Omega$  (считать, что начало системы координат находится в центре атома; напомним, что для фотонов должно выполняться равенство  $\hat{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$ ). Для нормировки фотонных волновых функций предполагается, что фотоны находятся в полости с объемом  $V$  (как в задаче 3.2).

### Решение

Число фотонных состояний  $dN$  в дифференциальном объеме фазового пространства равно

$$dN = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{d^3x d^3p}{\hbar^3}. \quad (3.74)$$

Интегрируя по объему полости и используя соотношение

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (3.75)$$

для фотонов, мы получаем

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega, \quad (3.76)$$

где  $d\Omega$  — дифференциальный телесный угол, в пределах которого распространяются испущенные фотоны. Мы предполагаем, что показатель преломления равен единице и  $k = \omega/c = E/(\hbar c)$ , где  $\omega$  — частота фотона. В результате имеем

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{E^2 dE}{\hbar^3 c^3} d\Omega, \quad (3.77)$$

<sup>1)</sup> Употребляя термин «первый порядок», мы имеем в виду, что учитываются только индуцированные гамильтонианом возмущения  $H'$  изменения волновых функций первого порядка. Это означает, что вероятность перехода между интересующими нас состояниями в течение времени действия возмущения  $H'$  на систему должна быть малой.

или

$$\rho_f(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{E^2}{\hbar^3 c^3} d\Omega. \quad (3.78)$$

**(6)** Формула (3.78) дает полное число фотонных состояний с энергией между  $E$  и  $E + dE$  в телесном угле  $d\Omega$ . Мы, однако, должны также включить множитель, учитывающий фотонные состояния с нужными (для осуществления перехода) частотами. Соответствующая функция должна учитывать ограничения на доступные конечные состояния, накладываемые, в частности, законами сохранения энергии и импульса. Мы будем здесь считать ядро бесконечно тяжелым, чтобы не беспокоиться об эффекте отдачи при испускании фотона. Мы будем также предполагать, что единственным источником уширения линии является конечное время жизни возбужденного состояния  $(1/\gamma)$ , связанное со спонтанным излучательным переходом  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$  (позже мы рассчитаем скорость спонтанного перехода  $\gamma$ ). Мы знаем из соотношения неопределенности Гейзенберга, что конечность времени жизни верхнего состояния приводит к неопределенности его энергии. В частности, экспоненциально затухающей вероятности обнаружить систему в состоянии  $|e\rangle$  соответствует лоренцево распределение  $P(\omega)$  разрешенных частот фотонов (см. задачу 9.3):

$$P(\omega) = \frac{\gamma/(2\pi)}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}, \quad (3.79)$$

где распределение нормировано таким образом, что интеграл по всем частотам дает единицу.

Как выглядит распределение  $P(\omega)$  частот фотонов, способных осуществить переход в пределе, когда  $\gamma$  стремится к нулю? Чему равна полная скорость перехода, проинтегрированная по всем частотам фотонов?

### Решение

При  $\gamma \rightarrow 0$   $P(\omega) \rightarrow \delta(\omega - \omega_0)$ , где  $\delta$  — дельта-функция Дирака. Чтобы убедиться в этом, обратимся к трем свойствам функции  $P(\omega)$ :

- ширина функции  $P(\omega)$  равна  $\gamma$ , следовательно, она стремится к нулю при  $\gamma \rightarrow 0$ ;
- амплитуда функции  $P(\omega)$  в резонансе ( $\omega = \omega_0$ ) равна  $2/(\pi\gamma)$ , и, следовательно, она стремится к бесконечности;
- в пределе  $\gamma \rightarrow 0$  интеграл  $P(\omega)$  по частотам равен единице, когда область интегрирования включает  $\omega_0$ , и нулю в других случаях.

Отсюда следует, что  $P(\omega) \rightarrow \delta(\omega - \omega_0)$  при  $\gamma \rightarrow 0$ . Результат интуитивно понятен, поскольку по мере того, как ширина линии перехода стремится к нулю, единственный способ вызвать переход состоит в том, чтобы в точности удовлетворить закону сохранения энергии. В этом пределе формула (3.73) приобретает вид

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|H'|i\rangle|^2 \rho_f(E) \delta(\hbar\omega_0 - E) dE. \quad (3.80)$$

Интегрируя по энергиям фотона, мы получаем знакомую форму золотого правила Ферми:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho_f(\hbar\omega_0). \quad (3.81)$$

**(в)** Обратимся теперь к матричному элементу  $\langle f | H' | i \rangle$ . Как выглядит гамильтониан взаимодействия  $H'$ ? Для начала мы можем выписать полный гамильтониан атомной системы в присутствии светового поля, заданного векторным потенциалом  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  с кулоновской калибровкой (см. задачу 3.2). Для простоты будем рассматривать одноэлектронный атом (распространение этой теории на многоэлектронные атомы осуществляется простым суммированием по всем электронам).

Полный гамильтониан одноэлектронного атома в присутствии светового поля представим в виде

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 - \frac{Ze^2}{r}, \quad (3.82)$$

где  $\vec{p}$  — канонический импульс (см., например, [Griffiths (1999)] или [Landau и Lifshitz (1987)]), напомним, что в этой книге мы принимаем заряд электрона равным  $-e$ .

Разобьем полный гамильтониан на гамильтониан возмущения  $H'$  и гамильтониан невозмущенный  $H_0$ .

Показать, что

$$H \approx H_0 + H', \quad (3.83)$$

где

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad (3.84)$$

— это обычный гамильтониан невозмущенного одноэлектронного атома, и

$$H' = \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}, \quad (3.85)$$

где мы полагаем, что

$$|\vec{p}| \gg \frac{e}{c} |\vec{A}|. \quad (3.86)$$

В чем состоит физический смысл условия (3.86)?

### Решение

Разлагая в ряд первый член гамильтониана  $H$ , приведенного в (3.82), имеем

$$\frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2. \quad (3.87)$$

Вследствие условия (3.86) мы можем пренебречь членом  $\propto A^2$ , малым по сравнению с другими членами, так что

$$H \approx \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) - \frac{Ze^2}{r}. \quad (3.88)$$

Условие (3.86) также позволяет рассматривать члены, пропорциональные  $\vec{A}$ , как возмущение. В результате получаем, что

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

— это наш невозмущенный гамильтониан, а

$$H' = \frac{e}{2mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) \quad (3.89)$$

— гамильтониан возмущения.

Рассмотрим теперь член

$$\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} = 2\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} - \vec{p} \cdot \vec{A} = \quad (3.90)$$

$$= 2\vec{p} \cdot \vec{A} + [\vec{A}, \vec{p}]. \quad (3.91)$$

Если вспомнить, что  $\vec{p}$  является генератором бесконечно малой трансляции (см., например, [Bransden и Joachain (1989)]), то мы имеем

$$[\vec{A}, \vec{p}] = i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A}. \quad (3.92)$$

Однако, поскольку мы пользуемся кулоновской калибровкой, то  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ . Учитывая этот факт и подставляя (3.91) в (3.89), мы приходим к искомому выражению (3.85)

$$H' = \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}.$$

Условие (3.86) на самом деле подразумевает, что силы, обусловленные действием светового поля, значительно слабее электростатической силы, связывающей электрон с ядром. Это можно подтвердить следующим аргументом. Поскольку векторный потенциал осциллирует с частотой  $\omega$ , мы можем, используя уравнение (3.32), получить оценку для амплитуды светового поля  $\mathcal{E}_0$ :

$$\mathcal{E}_0 \sim \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} \sim \frac{\omega}{c} A, \quad (3.93)$$

следовательно сила, действующая на электрон со стороны световой волны, равна

$$F_{\text{light}} \sim e\mathcal{E}_0 \sim \omega \frac{e}{c} A. \quad (3.94)$$

Вблизи резонанса мы можем написать

$$\omega \approx \omega_0 \sim \frac{e^2}{\hbar a_0}. \quad (3.95)$$

Если мы потребуем, чтобы сила  $F_{\text{bind}} \sim e^2/a_0^2$ , действующая на электрон вследствие электростатического притяжения электрона к ядру, была много больше, чем  $F_{\text{light}}$ , то после несложных алгебраических преобразований мы получим

$$\frac{\hbar}{a_0} \gg \frac{e}{c} A. \quad (3.96)$$

Из соотношения неопределенности Гейзенберга следует, что  $p \sim \hbar/a_0$ , откуда следует условие (3.86).



(**г**) Как уже отмечалось выше, состояния  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  включают в себя как состояние атома, так и состояние фотона. Ниже мы проведем расчеты для одной моды электромагнитного поля. Позднее плотность состояний и функции распределения в золотом правиле Ферми будут учтены путем суммирования по всем актуальным модам. Таким образом для полного гамильтониана, описывающего и атом, и световое поле, мы должны учесть гамильтониан электромагнитного поля  $H_{em}$  (уравнение (3.72)), следовательно

$$H_{\text{tot}} = H + H_{em} = H_0 + H_{em} + H'. \quad (3.97)$$

Интерпретация  $H_{\text{tot}}$  довольно очевидна:  $H_0$  — гамильтониан невозмущенной атомной системы,  $H_{em}$  — гамильтониан свободного электромагнитного поля, а  $H'$  описывает взаимодействие между ними. Пренебрегая возмущением  $H'$ , мы видим, что  $H_0$  и  $H_{em}$  действуют на полностью независимые системы. Поэтому невозмущенные собственные состояния энергии могут быть представлены как произведения атомных и фотонных состояний  $|g, J, M_J\rangle|n\rangle$  и  $|e, J', M'_J\rangle|n'\rangle$ .

Используя выражение (3.66) для векторного потенциала через операторы рождения и уничтожения фотона в выражении (3.85) для  $H'$ , получить матричные элементы для испускания одиночного фотона.

### Решение

Выразим  $H'$  через  $a$  и  $a^\dagger$ :

$$H' = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \left[ a(\vec{p} \cdot \hat{\epsilon}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + a^\dagger(\vec{p} \cdot \hat{\epsilon}^*) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right]. \quad (3.98)$$

Начальное состояние имеет вид  $|i\rangle = |e, J', M'_J\rangle|n\rangle$ , а конечное —  $|f\rangle = |g, J, M_J\rangle|n'\rangle$ . Закон сохранения энергии (см. п. (б)) требует, чтобы атом отдал энергию  $\approx \hbar\omega_0$  в электромагнитное поле, так что выполняется равенство  $n' = n + 1$ , означающее, что это — акт испускания. Затем, только член с  $a^\dagger$  в (3.98) вносит вклад в матричный элемент, поскольку  $\langle n + 1 | a | n \rangle = 0$ , таким образом

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar(n+1)}{V\omega}} \langle g, J, M_J | (\vec{p} \cdot \hat{\epsilon}^*) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | e, J', M'_J \rangle, \quad (3.99)$$

где мы использовали соотношения

$$\langle n + 1 | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n + 1} \quad \langle n + 1 | n + 1 \rangle = \sqrt{n + 1}. \quad (3.100)$$

(**д**) Чтобы найти скорость испускания, мы должны определить матричные элементы переходов между атомными состояниями. Именно здесь мы пользуемся электрическим дипольным ( $E1$ ) приближением, о котором говорилось в начале задачи. Мы предполагаем, что размеры электронного облака много меньше длины световой волны, поэтому

$$\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1 \quad (3.101)$$

и, следовательно,  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sim 1$ .

Выразить атомный матричный элемент

$$\langle g, J, M_J | \vec{p} \cdot \hat{\epsilon}^* | e, J', M'_J \rangle$$

через  $\vec{r}$  вместо  $\vec{p}$ .

### Решение

Сначала обратимся к уравнению движения Гейзенберга для атомных переменных (см., например, [Bransden и Joachain (1989), Griffiths (1995)], или [Landau и Lifshitz (1977)])

$$[\vec{r}, H_0] = i\hbar \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{i\hbar \vec{p}}{m}. \quad (3.102)$$

Используя (3.102), мы можем написать

$$\langle g, J, M_J | \vec{p} \cdot \hat{\epsilon}^* | e, J', M_J' \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle g, J, M_J | (\vec{r} H_0 - H_0 \vec{r}) \cdot \hat{\epsilon}^* | e, J', M_J' \rangle = \quad (3.103)$$

$$= -im\omega_0 \langle g, J, M_J | \vec{r} \cdot \hat{\epsilon}^* | e, J', M_J' \rangle. \quad (3.104)$$

(е) Вводя дипольный оператор  $\vec{d} = -e\vec{r}$  и пользуясь сферической системой координат и теоремой Вигнера–Эккарта (Приложение F), выразить скорость перехода для одной моды через коэффициенты Клебша–Гордона и приведенный матричный элемент  $\langle g, J || d || e, J' \rangle$ .

### Решение

В сферической системе координат (см. выражение (F.30)) мы имеем

$$\vec{d} \cdot \hat{\epsilon}^* = \sum_q d_q \epsilon_q. \quad (3.105)$$

Используя электрически-дипольное приближение и подставляя (3.99) и (3.105) в (3.121), получаем

$$\langle f | H' | i \rangle = i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0(n+1)}{V}} \sum_q \langle g, J, M_J | d_q \epsilon_q | e, J', M_J' \rangle. \quad (3.106)$$

Пользуясь теоремой Вигнера–Эккарта (F.1), получаем

$$\langle f | H' | i \rangle = i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0(n+1)}{V}} \frac{\langle g, J || d || e, J' \rangle}{\sqrt{2J+1}} \sum_q \langle J', M_J', 1, q | J, M_J \rangle \epsilon_q. \quad (3.107)$$

Возводя в квадрат абсолютное значение матричного элемента, имеем

$$|\langle f | H' | i \rangle|^2 = \frac{2\pi\hbar\omega_0(n+1)}{V} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{2J+1} \left( \sum_q \langle J', M_J', 1, q | J, M_J \rangle \epsilon_q \right)^2. \quad (3.108)$$

Подставляя выражения (3.108) и (3.78) в золотое правило Ферми (3.81) и полагая  $\omega = \omega_0$ , получаем формулу для вынужденного и спонтанного излучения в одну моду

$$dW_{ge} = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3} (n+1) \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{2J+1} \left( \sum_q \langle J', M_J', 1, q | J, M_J \rangle \epsilon_q \right)^2 d\Omega. \quad (3.109)$$

Здесь слагаемое 1 в множителе  $n + 1$  представляет спонтанное излучение, а  $n$  — вынужденное излучение.

(ж) рассчитать скорость спонтанного испускания в любом направлении и при любой поляризации, полагая, что возбужденное состояние является неполяризованным. Это — скорость спонтанного затухания  $\gamma$ , о которой говорилось в п. (б).

### Решение

Рассмотрим конкретную поляризацию  $\hat{\epsilon}$  для спонтанно испускаемого света. Поскольку существуют два независимых состояния поляризации для заданного вектора  $\vec{k}$ , мы должны будем домножить наш конечный результат на 2 (для рассматриваемого полностью неполяризованного образца пространство не имеет никакого выделенного направления). Без потери общности мы можем направить  $\hat{\epsilon}$  вдоль оси квантования ( $\hat{z}$ ), так что  $\epsilon_0 = 1$  и  $\epsilon_{\pm 1} = 0$ . Спонтанное излучение вызывается вакуумными флуктуациями, т. е. энергией нулевых колебаний, поэтому  $n = 0$ . Поскольку все пространственные направления в данной задаче эквивалентны, мы должны также провести суммирование по всем возможным зеемановским подуровням основного состояния ( $M$ ) и усреднить по подуровням возбужденного состояния ( $M'$ )<sup>1)</sup>. Используя эти аргументы, мы получаем из соотношения (3.109)

$$dW_{ge}^{(spont)} = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{(2J+1)(2J'+1)} \sum_{M_J} \sum_{M'_J} \langle J', M'_J, 1, 0 | J, M_J \rangle^2 d\Omega. \quad (3.110)$$

Теперь мы хотим провести суммирование по коэффициентам Клебша–Гордона. Согласно тождеству (справедливому до тех пор, пока  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ )<sup>2)</sup>

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m \rangle^2 = 1. \quad (3.111)$$

Используя тождество (3.111), мы можем написать

$$\begin{aligned} \sum_q \sum_{M_J} \sum_{M'_J} \langle J', M'_J, 1, q | J, M_J \rangle^2 &= \sum_{M_J} \left( \sum_{M'_J} \sum_q \langle J', M'_J, 1, q | J, M_J \rangle^2 \right) = \\ &= \sum_{M_J} 1 = 2J + 1. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Сумма с одним конкретным  $q$  должна дать одну треть полной суммы, поскольку изотропность пространства требует, чтобы вклады, соответствующие различным вы-

<sup>1)</sup> Эта процедура эквивалентна расчету скорости затухания для всех трех возможных поляризаций света с данного подуровня.

<sup>2)</sup> Эта формула является следствием того факта, что мы можем проектировать вектор состояния  $|j, m\rangle$  на базис произведения  $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ . Поскольку  $\langle j, m | j, m \rangle = 1$ , сумма квадратов всех коэффициентов в этом разложении должна быть равна единице, приводя к выражению (3.111).

борам  $q$ , были равны, и мы приходим к выводу, что

$$\sum_{M_J} \sum_{M'_J} |\langle J', M'_J, 1, 0 | J, M_J \rangle|^2 = \frac{2J+1}{3} \quad (3.113)$$

и, следовательно,

$$dW_{ge}^{(spont)} = \frac{1}{6\pi} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{2J'+1}. \quad (3.114)$$

Интегрируя по полному телесному углу и домножая результат на 2 (учитывая две возможных поляризации), мы получаем

$$\gamma = \frac{4\omega_0^3}{3\hbar c^3} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{2J'+1}. \quad (3.115)$$

Здесь мы приняли, что состояние  $|e\rangle$  переходит при затухании только в состояние  $|g\rangle$ , и следовательно, только рассматриваемый переход ответственен за спонтанное излучение. Если, что часто имеет место в реальных атомных системах, состояние  $|e\rangle$  может распадаться на несколько различных состояний  $|g_i\rangle$ , то мы имеем

$$\gamma = \sum_i \gamma_i = \sum_i \xi_i \gamma, \quad (3.116)$$

где  $\gamma_i$  — *парциальная ширина*, а коэффициенты  $\xi_i$  известны под названием *коэффициентов ветвления*. Следовательно, чтобы определить величину приведенного матричного элемента  $|\langle g_i, J || d || e, J' \rangle|$  по экспериментально измеряемым параметрам, следует знать как время жизни  $1/\gamma$ , так и коэффициент ветвления  $\xi_i$ :

$$|\langle g_i, J || d || e, J' \rangle|^2 = \frac{3\hbar c^3}{4\omega_0^3} (2J'+1) \xi_i \gamma. \quad (3.117)$$

### 3.4. Поглощение света атомами

Здесь мы применим методы, развитые в задаче 3.3 для описания испускания света, чтобы описать обратный процесс поглощения фотона атомной системой. (Результаты этих расчетов можно сравнить с результатами, полученными в задаче 3.1 с помощью иного подхода.)

Мы будем рассматривать такую же систему, как и в задаче 3.3: атом с основным состоянием  $|g\rangle$ , имеющим нулевую энергию и полный угловой момент  $J$ , и с возбужденным состоянием  $|e\rangle$ , имеющим энергию  $\hbar\omega_0$  и угловой момент  $J'$ . Зеемановские подуровни обозначаются проекциями угловых моментов на ось квантования  $z$ :  $M_J$  и  $M'_J$  соответственно.

Пусть монохроматический световой пучок (с шириной спектра значительно более узкой, чем ширина верхнего уровня  $\gamma$ , равная скорости спонтанного испускания) падает на атом, находящийся на одном из зеемановских подуровней основного состояния. Мы предполагаем, что свет попадает в резонанс  $\omega = \omega_0$  и линейно поляризован вдоль оси квантования  $z$ . Интенсивность пучка предполагается достаточно малой, так что еще выполняется условие

$$|\vec{p}| \gg \frac{e}{c} |\vec{A}|.$$

Чтобы определить скорость поглощения, мы опять воспользуемся золотым правилом Ферми (3.73):

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho_f(E) P(E) dE,$$

но теперь вместо плотности фотонных состояний (3.78) мы имеем одно конечное состояние (один фотон, поглощенный из моды электромагнитного поля, и атом на конкретном зеемановском подуровне верхнего состояния) и, таким образом,  $\rho_f = \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0)$ .

**(а)** Используя гамильтониан (3.98) и электрическое дипольное приближение, написать выражение для квадрата матричного элемента  $\langle f | H' | i \rangle$ , где для поглощения

$$|i\rangle = |g, J, M_J\rangle |n\rangle$$

и

$$|f\rangle = |e, J', M'_J\rangle |n-1\rangle.$$

**(б)** Используя функцию распределения Лоренца (3.79) при резонансе  $\omega = \omega_0$  в золотом правиле Ферми, выразить скорость поглощения через амплитуду электрического поля световой волны  $\mathcal{E}_0$ .

**(в)** Показать, что скорость поглощения для перехода  $|g, J, M_J\rangle \rightarrow |e, J', M'_J\rangle$  равна скорости вынужденного излучения для перехода  $|e, J', M'_J\rangle \rightarrow |g, J, M_J\rangle$ .

### Подсказка

В п. (в) полезно использовать соотношение между приведенными матричными элементами [Sobelman (1992)]

$$\langle e, J' | d | g, J \rangle = (-1)^{J'-J} \langle g, J | d | e, J' \rangle^* \quad (3.118)$$

и соотношение между коэффициентами Клебша–Гордона [Varshalovich и др. (1998)],

$$\langle J, M_J, \kappa, q | J', M'_J \rangle = (-1)^{J-J'+q} \sqrt{\frac{2J'+1}{2J+1}} \langle J', M'_J, \kappa, -q | J, M_J \rangle. \quad (3.119)$$

### Решение

**(а)** Гамильтониан возмущения в электрическом дипольном приближении может быть найден с помощью уравнения (3.98) и условия (3.101):

$$H' = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} [a(\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}) + a^\dagger(\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}^*)]. \quad (3.120)$$

В матричный элемент вносит вклад только член с  $a$  из выражения (3.98), поскольку  $\langle n-1 | a^\dagger | n \rangle = 0$ . Таким образом

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar n}{V\omega}} \langle e, J', M'_J | (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}) | g, J, M_J \rangle, \quad (3.121)$$

где мы использовали

$$\langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n} \quad \langle n-1 | n-1 \rangle = \sqrt{n}. \quad (3.122)$$

Матричный элемент  $\langle e, J', M_J' | (\vec{p} \cdot \hat{\epsilon}) | g, J, M_J \rangle$  определяется комплексным сопряжением выражения (3.104), и в сферической системе координат мы получаем

$$\langle f | H' | i \rangle = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0 n}{V}} \sum_q \langle e, J', M_J' | d_q \epsilon_q | g, J, M_J \rangle. \quad (3.123)$$

Из теоремы Вигнера–Эккарта (F.1) имеем

$$\langle f | H' | i \rangle = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0 n}{V}} \frac{\langle e, J' || d || g, J \rangle}{\sqrt{2J' + 1}} \sum_q \langle J, M_J, 1, q | J', M_J' \rangle \epsilon_q. \quad (3.124)$$

Для случая  $z$ -поляризованного света  $q = 0$  ( $\epsilon_0 = 1$ ,  $\epsilon_{\pm 1} = 0$ ), следовательно

$$\langle f | H' | i \rangle = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0 n}{V}} \frac{\langle e, J' || d || g, J \rangle}{\sqrt{2J' + 1}} \langle J, M_J, 1, 0 | J', M_J' \rangle. \quad (3.125)$$

Возводя в квадрат матричные элементы, получаем

$$|\langle f | H' | i \rangle|^2 = \frac{2\pi\hbar\omega_0 n}{V} \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2}{2J' + 1} \langle J, M_J, 1, 0 | J', M_J' \rangle^2. \quad (3.126)$$

**(6)** Скорость поглощения фотонов из одной моды электромагнитного поля можно получить, подставляя величину  $2/(\hbar\pi\gamma)$  в качестве резонансного значения распределения Лоренца (уравнение (3.79)) в золотое правило Ферми:

$$W_{eg} = \frac{4}{\gamma\hbar^2} |\langle f | H' | i \rangle|^2, \quad (3.127)$$

где квадрат матричного элемента дается формулой (3.126).

Все, что осталось сделать — это связать число фотонов в моде  $n$  с амплитудой электрического поля  $\mathcal{E}_0$ . Средняя интенсивность света  $I$  определяется усредненной по времени величиной вектора Пойнтинга

$$I = \frac{c\mathcal{E}_0^2}{8\pi}, \quad (3.128)$$

а также произведением потока фотонов  $nc/V$  на энергию одного фотона  $\hbar\omega$

$$I = \frac{n}{V} \hbar\omega c. \quad (3.129)$$

Приравнявая эти два выражения для интенсивности света  $I$ , мы получаем

$$n = \frac{V\mathcal{E}_0^2}{8\pi\hbar\omega}. \quad (3.130)$$

Таким образом квадрат матричного элемента (3.126) выражается через  $\mathcal{E}_0$  следующим образом:

$$|\langle f | H' | i \rangle|^2 = \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{4} \frac{\langle J, M_J, 1, 0 | J', M_J' \rangle^2}{2J' + 1}. \quad (3.131)$$

В результате, для скорости поглощения получаем

$$W_{eg} = \frac{1}{\gamma} \frac{|\langle e, J' | d | g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{\langle J, M_J, 1, 0 | J', M_J' \rangle^2}{2J' + 1}. \quad (3.132)$$

(в) В данных условиях из выражения (3.109) мы получаем для квадрата абсолютной величины матричного элемента, описывающего вынужденное излучение,

$$|\langle g, J, M_J | H' | e, J', M_J' \rangle|^2 = \frac{2\pi\hbar\omega_0 n}{V} \frac{|\langle g, J | d | e, J' \rangle|^2}{2J + 1} \langle J', M_J', 1, 0 | J, M_J \rangle^2. \quad (3.133)$$

Выражение (3.130) можно использовать, чтобы выразить число фотонов в моде ( $n$ ) через амплитуду электрического поля  $\mathcal{E}_0$ , и, как уже отмечалось в п. (б),

$$\int P(E) \rho_f(E) dE = \frac{2}{\hbar\pi\gamma}. \quad (3.134)$$

В результате, для скорости вынужденного излучения имеем

$$W_{ge} = \frac{1}{\gamma} \frac{|\langle g, J | d | e, J' \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{\langle J', M_J', 1, 0 | J, M_J \rangle^2}{2J + 1}. \quad (3.135)$$

На конечном этапе подставим соотношения (3.118) и (3.119), о которых говорилось в подсказке к задаче, в выражение (3.35). В результате получаем

$$W_{ge} = \frac{1}{\gamma} \frac{|\langle e, J' | d | g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{\langle J, M_J, 1, 0 | J', M_J' \rangle^2}{2J' + 1}, \quad (3.136)$$

и, действительно,  $W_{ge} = W_{eg}$ . Интересно сравнить этот аргумент с тем, который использовал Эйнштейн при выводе коэффициентов  $A$  и  $B$  (см., например, [Griffiths (1995)]).

### 3.5. Сечение резонансного поглощения

При изучении поглощения света атомной средой очень удобным понятием является *эффективное* сечение поглощения  $\sigma_{\text{abs}}$ , позволяющее выразить скорость возбуждения как произведение потока фотонов  $\Phi$  на сечение  $\sigma_{\text{abs}}$  поглощающего объекта.

Рассмотрим переходы между основным состоянием  $|g\rangle$  с полным угловым моментом  $J$  и возбужденным состоянием  $|e\rangle$  с угловым моментом  $J'$ , отстоящим от основного состояния по энергии на  $\hbar\omega_0$ . Будем предполагать, что атомы первоначально не поляризованы и падающей свет соответствует резонансу ( $\omega = \omega_0$ ). Рассчитать сечение поглощения (усредненное по начальным состояниям  $M_J$ ) в предположении однородного лоренцева уширения перехода.

#### Решение

Сечение резонансного поглощения  $\sigma_{\text{abs}}$  дается формулой

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{W_{eg}}{\Phi}, \quad (3.137)$$

где  $W_{eg}$  — скорость возбуждения, обусловленного поглощением. Мы можем рассчитать  $W_{eg}$ , используя формулу (3.132) из задачи 3.4, в которой мы теперь выбираем

линейную поляризацию (впрочем, легко убедиться в том, что выбор поляризации не влияет на конечный результат!):

$$W_{eg} = \frac{1}{\gamma_{\text{tot}}} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{(2J' + 1)(2J + 1)} \sum_{M_J} \sum_{M'_J} |\langle J, M_J, 1, 0 | J', M'_J \rangle|^2, \quad (3.138)$$

где  $\gamma_{\text{tot}}$  обозначает полную ширину перехода (учитывающую, например, спонтанный распад возбужденного уровня на другие состояния, уширение давлением и т.д.). Чтобы учесть все возможные переходы между различными зеемановскими подуровнями, здесь проведено суммирование по конечным состояниям ( $M'_J$ ) и усреднение по начальным состояниям ( $M_J$ ). Используя формулу (3.113), мы можем написать

$$\sum_{M_J} \sum_{M'_J} |\langle J, M_J, 1, 0 | J', M'_J \rangle|^2 = \frac{2J' + 1}{3}, \quad (3.139)$$

откуда получаем

$$W_{eg} = \frac{1}{\gamma_{\text{tot}}} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{3(2J + 1)}. \quad (3.140)$$

Выражение для потока фотонов имеет вид

$$\Phi = \frac{1}{\hbar \omega_0} \frac{c \mathcal{E}_0^2}{8\pi}, \quad (3.141)$$

и, в результате, имеем

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{8\pi}{3} \frac{\omega_0}{c} \frac{1}{\hbar \gamma_{\text{tot}}} \frac{|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2}{2J + 1}. \quad (3.142)$$

Теперь мы можем выразить приведенный дипольный момент  $|\langle g, J || d || e, J' \rangle|$  через скорость спонтанного распада состояния  $|e\rangle$  в состояние  $|g\rangle$  (выражение (3.115)) (так называемая парциальная ширина перехода  $\gamma_p$ ):

$$|\langle g, J || d || e, J' \rangle|^2 = (2J' + 1) \frac{3}{4} \frac{\hbar c^3}{\omega_0^3} \gamma_p; \quad (3.143)$$

(3.143), будучи подставленным в (3.142), дает

$$\sigma_{\text{abs}} = 2\pi \frac{c^2}{\omega_0^2} \frac{2J' + 1}{2J + 1} \frac{\gamma_p}{\gamma_{\text{tot}}}, \quad (3.144)$$

или

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \frac{2J' + 1}{2J + 1} \frac{\gamma_p}{\gamma_{\text{tot}}}, \quad (3.145)$$

где  $\lambda$  — длина волны излучения перехода. Множители  $2J + 1$  и  $2J' + 1$  — это статистические веса основного и возбужденного состояний соответственно.

Мы получили очень важный и интересный результат. Возьмем, например, изолированный переход  $J \rightarrow J$  ( $\gamma_p = \gamma_{\text{tot}}$ ) (см. 3.143). Сечение поглощения

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \quad (3.146)$$



не зависит ни от чего, кроме длины световой волны! Таким образом, сечение резонансного поглощения  $\sigma_{\text{abs}}$  одно и то же для слабого и для сильного переходов. Расхожее мнение о том, что слабые переходы имеют малое сечение поглощения, обязано множителю  $\gamma_p/\gamma_{\text{tot}}$ . Заметим также, что та же формула (3.145) фактически справедлива для магнитных дипольных переходов ( $M1$ ), электрических квадрупольных ( $E2$ ) и т. д.

### 3.6. Сечение поглощения для линии с доплеровским уширением

В разреженных атомных парах доминирующий механизм уширения линий оптических переходов связан с доплеровскими смещениями световых частот, «видимых» движущимися атомами. Допустим, мы наблюдаем люминесценцию в направлении оси  $\hat{z}$ . Для атома, движущегося со скоростью  $v_z$  вдоль  $\hat{z}$ , регистрируемая частота испускаемого света равна

$$\omega' \approx \omega \left( 1 + \frac{v_z}{c} \right). \quad (3.147)$$

Движение атомов в газовой ячейке подчиняется максвелловскому распределению по скоростям, т. е. плотность атомов  $n_v(v_z) dv_z$  с составляющей скорости вдоль оси  $z$ , лежащей между  $v_z$  и  $v_z + dv_z$ , дается выражением

$$n_v(v_z) dv_z = n_{\text{tot}} \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-Mv_z^2/(2k_B T)} dv_z, \quad (3.148)$$

где  $n_{\text{tot}}$  — полная плотность атомов,  $M$  — масса атома и  $k_B$  — постоянная Больцмана. При доминирующем вкладе доплеровского уширения в ширину перехода, форма линии люминесценции является гауссовой:

$$I_F(\Delta) = I_F(0) e^{-(\Delta/\Gamma_D)^2}, \quad (3.149)$$

где  $I_F(\Delta)$  — интенсивность флуоресценции,  $\Delta = \omega - \omega_0$  — отстройка частоты света  $\omega$  от резонансной частоты  $\omega_0$  и

$$\Gamma_D = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} \quad (3.150)$$

— доплеровская ширина.

Пусть пиковое значение резонансного сечения поглощения света для неподвижных атомов равно  $\sigma_0$  (см. задачу 3.5), а однородная ширина перехода (полная ширина на полувысоте) равна  $\gamma$ . Чему равно пиковое сечение поглощения ( $\sigma_D$ ), если атомы находятся в состоянии теплового движения, так что доплеровская ширина линии велика:  $\Gamma_D \gg \gamma$ ?

#### Решение

В отсутствие доплеровского уширения контур однородного лоренцева уширения описывается формулой

$$\sigma_{\text{hom}}(\Delta) = \sigma_0 \frac{\gamma^2/4}{\Delta^2 + \gamma^2/4}, \quad (3.151)$$

где  $\Delta = \omega - \omega_0$  — отстройка оптической частоты  $\omega$  от резонансной частоты  $\omega_0$ . В пределе большой доплеровской ширины частотная зависимость сечения имеет вид

$$\sigma(\Delta) = \sigma_D e^{-(\Delta/\Gamma_D)^2}. \quad (3.152)$$

Для установления связи между  $\sigma_D$  и  $\sigma_0$  заметим, что доплеровское уширение не меняет площадь под кривой поглощения. Действительно, неоднородное уширение (т. е., уширение, возникающее вследствие разницы резонансных частот для различных атомов) просто разносит центральные частоты резонансов отдельных атомов, не меняя формы линии поглощения каждого атома. Мы имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_{\text{hom}}(\Delta) d\Delta = \frac{\pi}{2} \gamma \sigma_0; \quad (3.153)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_D(\Delta) d\Delta = \sqrt{\pi} \Gamma_D \sigma_D. \quad (3.154)$$

Приравнявая эти два интеграла, получаем

$$\sigma_D = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\gamma}{\Gamma_D} \sigma_0 \approx 0,89 \times \frac{\gamma}{\Gamma_D} \sigma_0. \quad (3.155)$$

### 3.7. Параметры насыщения (У)

Рассмотрим ансамбль атомов, находящихся в световом поле. Допустим, мы хотим исследовать некое свойство атомов с помощью света — например, мы хотим измерить силу определенного перехода. В таком случае мы должны внимательно следить за тем, чтобы световое поле не возмущало свойств атомов, которые мы собираемся измерять. С другой стороны, мы можем интересоваться наблюдением некоторых нелинейных оптических процессов или оптически перекачать все атомы на определенный зеemanовский подуровень. В этом случае нужно, чтобы световое поле существенно возмущало атомную систему.

Основным параметром, определяющим, в каком режиме мы находимся, т. е. возмущает ли существенно световое поле атомные состояния, является *параметр насыщения*  $\kappa$ . Параметр насыщения в общем виде описывается соотношением

$$\kappa = \frac{\text{скорость возбуждения}}{\text{скорость релаксации}}. \quad (3.156)$$

Тонкость состоит в том, что точная форма  $\kappa$  и поведение системы как функции  $\kappa$  зависит от конкретной системы — от структуры энергетических уровней атома, от механизмов релаксации и т. д. В этой задаче мы рассмотрим разные системы, чтобы познакомиться с расчетами параметров насыщения и понять их роль.

В пунктах (а) и (б) мы будем полагать, что свет настроен на резонанс и оптическая толщина среды мала, т. е.

$$n\sigma_{\text{abs}}\ell \ll 1, \quad (3.157)$$

где  $\ell$  — длина атомного образца,  $n$  — плотность атомов и  $\sigma_{\text{abs}}$  — соответствующее сечение поглощения (см. задачи 3.5 и 3.6). Величину  $\ell_0 = (n\sigma_{\text{abs}})^{-1}$  обычно называют

длиной поглощения. Условие (3.157) означает, что интенсивность светового поля не меняется существенным образом по мере распространения света через образец и что до тех пор, пока все размеры образца малы в том же смысле, эффекты высокой плотности атомов, типа *пленения излучения*<sup>1)</sup>, не существенны. Кроме того, мы предполагаем, что среднее расстояние между атомами  $n^{-1/3}$  значительно превышает длину световой волны  $\lambda$ . Это позволяет нам пренебречь эффектами кооперативного взаимодействия атомов (такими, как сверхизлучение Дике [Dicke (1954)], см. задачу (3.14)).

(a) Рассмотрим двухуровневый неподвижный атом, единственным источником уширения линии которого является спонтанный распад верхнего состояния  $|e\rangle$  на нижний уровень  $|g\rangle$  (рис. 3.5). Рассчитать параметр насыщения  $\kappa$  для перехода  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  для монохроматического падающего света и найти зависимость интенсивности флуоресценции от  $\kappa$ .

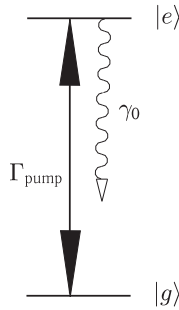


Рис. 3.5. Энергетическая диаграмма двухуровневой системы, рассматриваемой в п. (a)

### Решение

Скорость возбуждения  $\Gamma_{\text{pump}}$  (мы можем считать, что свет эффективно «переклачивает» атомы в возбужденное состояние) описывается выражением (3.132) из задачи 3.4:

$$\Gamma_{\text{pump}} = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0}, \quad (3.158)$$

где  $d$  — дипольный матричный элемент  $\langle e|d|g\rangle$  перехода между состояниями,  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда поля световой волны,  $\gamma_0$  — скорость спонтанного распада из состояния  $|e\rangle$  в состояние  $|g\rangle$ , и мы положили  $\hbar = 1$ . Скорость релаксации в этой задаче равна  $\gamma_0$ , поэтому из (3.156) мы имеем

$$\kappa = \frac{\Gamma_{\text{pump}}}{\gamma_0} = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0^2}. \quad (3.159)$$

Интенсивность флуоресценции  $I_F$  пропорциональна произведению числа атомов в возбужденном состоянии  $N_e$  на скорость спонтанного распада  $\gamma_0$ . Чтобы найти

<sup>1)</sup> Когда плотность атомов достаточно высока, становится вероятным перепоглощение средой спонтанно испущенного фотона. Таким образом, фотоны должны выходить из образца диффузионным образом, что может оказывать влияние, например, на результаты измерения времени жизни возбужденного состояния. См., например, [Corney (1988)].

населенность верхнего состояния, мы можем написать кинетические уравнения для числа атомов в возбужденном состоянии  $N_e$  и числа атомов в основном состоянии  $N_g$ :

$$\frac{dN_g}{dt} = -\Gamma_{\text{pump}}N_g + (\gamma_0 + \Gamma_{\text{pump}})N_e, \quad (3.160)$$

$$\frac{dN_e}{dt} = +\Gamma_{\text{pump}}N_g - (\gamma_0 + \Gamma_{\text{pump}})N_e. \quad (3.161)$$

Нам известно, что  $N_e + N_g = N_{\text{tot}}$ , где  $N_{\text{tot}}$  — полное число атомов в образце. Мы учли скорость накачки и для перехода  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ , и для перехода  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$ , поскольку при достаточно высокой мощности оптической накачки ( $\kappa \gtrsim 1$ ) вынужденное излучение из верхнего состояния становится существенной добавкой к спонтанному излучению. Из соображений время-инверсионной симметрии очевидно, что скорости вынужденного излучения и вынужденного поглощения должны быть равны (это также следует из знаменитого аргумента Эйнштейна при рассмотрении атомного газа, находящегося в тепловом равновесии с фотонным газом, и использованного при выводе коэффициентов  $A$  и  $B$ ; см., например, [Griffiths (1995)] или [Bransden и Joachain (1989)]). В условиях равновесия  $dN_e/dt$  и  $dN_g/dt$  равны нулю, и мы находим, что

$$N_e = \frac{\kappa}{1 + 2\kappa} N_{\text{tot}}, \quad (3.162)$$

и, следовательно, интенсивность флуоресценции пропорциональна  $\kappa/(1 + 2\kappa)$  (рис. 3.6).

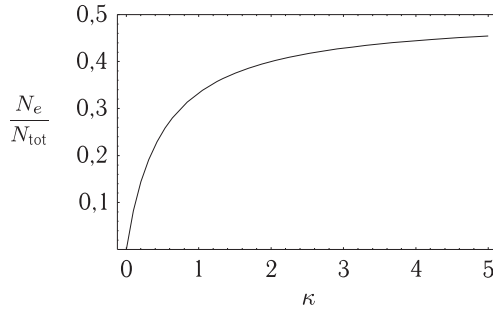


Рис. 3.6. Относительная заселенность возбужденного состояния как функция параметра насыщения  $\kappa$  для случая, описанного в п. (а). Интенсивность флуоресценции  $I_F$  пропорциональна  $\gamma_0 N_e$

**(б)** Предположим теперь, что мы имеем трехуровневую систему, показанную на рис. 3.7. Падающий свет резонансен переходу  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ , а возбужденное состояние  $|e\rangle$  распадается преимущественно в метастабильное состояние  $|m\rangle$  со скоростью  $\gamma_0$ . Метастабильный уровень распадается на основное состояние  $|g\rangle$  с малой скоростью  $\gamma_{\text{rel}} \ll \gamma_0$ . Состояния  $|g\rangle$  и  $|m\rangle$  могут быть, например, различными сверхтонкими подуровнями основного состояния, а  $\gamma_{\text{rel}}$  может быть обусловлено столкновительной релаксацией. Опять же примем, что мы можем пренебречь доплеровским уширением и что возбуждающее излучение является монохроматическим.

Рассчитать параметр насыщения  $\kappa$  для этого случая и найти зависимость интенсивности флуоресценции от  $\kappa$ .

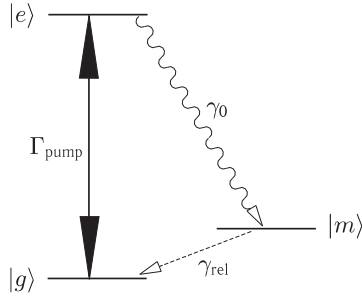


Рис. 3.7. Энергетическая диаграмма трехуровневой системы, рассматриваемой в п. (б)

### Решение

Скорость релаксации в уравнении (3.156) — это обычно самая низкая скорость релаксации в системе, поскольку этот процесс становится «узким горлом» для некогерентного процесса возвращения атомов в основное состояние. Следовательно, в этом случае параметр насыщения имеет вид

$$\kappa = \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{\gamma_0 \gamma_{\text{rel}}}, \quad (3.163)$$

поскольку  $\gamma_{\text{rel}}$  — это самая малая скорость релаксации в системе.

Чтобы проверить выражение (3.163) и найти зависимость интенсивности спонтанного излучения от  $\kappa$ , опять запишем соответствующие кинетические уравнения, как мы это делали в п. (а):

$$\frac{dN_g}{dt} = -\Gamma_{\text{pump}} N_g + \gamma_{\text{rel}} N_m, \quad (3.164)$$

$$\frac{dN_e}{dt} = +\Gamma_{\text{pump}} N_g - \gamma_0 N_e, \quad (3.165)$$

$$\frac{dN_m}{dt} = +\gamma_0 N_e - \gamma_{\text{rel}} N_m, \quad (3.166)$$

где мы пренебрегли вынужденным излучением (поскольку переход насыщается долго до того, как вынужденное излучение становится существенным). Мы также имеем условие  $N_m + N_e + N_g = N_{\text{tot}}$ . Приравняв нулю производные по времени от населенностей уровней, чтобы получить стационарное решение, после некоторых алгебраических преобразований (и принимая во внимание, что  $\gamma_{\text{rel}} \ll \gamma_0$ ) находим для населенности возбужденного уровня (рис. 3.8)

$$N_e = \frac{\kappa}{1 + \kappa} \frac{\gamma_{\text{rel}}}{\gamma_0} N_{\text{tot}}. \quad (3.167)$$

Заметим, что максимальная населенность верхнего состояния (получаемая при  $\kappa \gg \gg 1$ ) равна

$$N_e(\text{max}) = \frac{\gamma_{\text{rel}}}{\gamma_0} N_{\text{tot}}. \quad (3.168)$$

Интенсивность флуоресценции опять же пропорциональна  $\gamma_0 N_e$ , поэтому максимальная интенсивность люминесценции меньше, чем в двухуровневом случае в  $2\gamma_{\text{rel}}/\gamma_0$  раз, поскольку атомы стремятся заселить состояние «узкого горла».

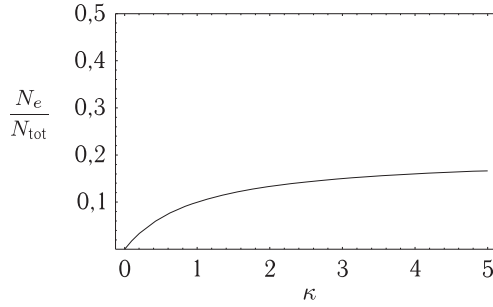


Рис. 3.8. Относительная населенность возбужденного состояния как функция параметра насыщения  $\kappa$  для случая, рассмотренного в п. (б). Для этого графика мы приняли  $\gamma_{\text{rel}}/\gamma_0 = 0,2$

**(в)** Обсудим теперь явление *полевого уширения*. Рассмотрим атомную систему, которую мы обсуждали в п. (б) этой задачи (рис. 3.7).

Если сканировать частоту лазера через атомный резонанс при низкой световой мощности [ $\kappa \ll 1$ , где  $\kappa$  дается выражением (3.164)], то мы обнаружим, что интенсивность флуоресценции, измеряемой как функция расстройки, характеризуется лоренцевой формой линии с шириной  $\gamma_0$ .

Какова зависимость интенсивности флуоресценции  $I_F(\Delta)$  от расстройки при больших значениях  $\kappa$ ?

### Решение

При сканировании частоты возбуждающего излучения через резонанс с переходом  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  скорость накачки  $\Gamma_{\text{pump}}$  меняется по лоренцевому закону<sup>1)</sup>, и мы получаем эффективный параметр насыщения  $\kappa_{\text{eff}}(\Delta)$ , который зависит от отстройки  $\Delta$  возбуждающего излучения от резонанса:

$$\kappa_{\text{eff}}(\Delta) = \kappa \frac{\gamma_0^2/4}{\Delta^2 + \gamma_0^2/4}, \quad (3.169)$$

где  $\kappa$  — резонансный параметр насыщения (выражение (3.163)), и лоренциан нормирован на единицу при точном резонансе. Эффективный параметр насыщения  $\kappa_{\text{eff}}(\Delta)$  может быть непосредственно использован в кинетических уравнениях вместо  $\kappa$ , и мы получаем из формулы (3.167) интенсивность флуоресценции  $I_F(\Delta) \propto \gamma_0 N_e$  как функцию расстройки:

$$I_F(\Delta) \propto \frac{\kappa_{\text{eff}}(\Delta)}{1 + \kappa_{\text{eff}}(\Delta)} \gamma_{\text{rel}} N_{\text{tot}} = \quad (3.170)$$

$$= \kappa \frac{\gamma_0^2/4}{\Delta^2 + \gamma_0^2/4} \frac{1}{1 + \kappa \left( \frac{\gamma_0^2/4}{\Delta^2 + \gamma_0^2/4} \right)} \gamma_{\text{rel}} N_{\text{tot}} = \quad (3.171)$$

$$= \frac{\gamma_0^2/4}{\Delta^2 + (1 + \kappa)\gamma_0^2/4} \kappa \gamma_{\text{rel}} N_{\text{tot}}. \quad (3.172)$$

<sup>1)</sup> Это можно увидеть из расчета скорости вынужденного поглощения, как это сделано в задаче 3.4, не делая предположения о резонансности возбуждающего излучения, но используя лоренцеву форму линии из (3.79).

Это всего лишь лоренцев контур с шириной,

$$\boxed{\gamma = \gamma_0 \sqrt{1 + \kappa}}, \quad (3.173)$$

известной как ширина, увеличенная за счет *полевого уширения*.

(**г**) Рассмотрим, наконец, как доплеровское уширение влияет на наши результаты. Когда атомы в образце имеют тепловое распределение по скоростям, с точки зрения движущегося атома частота света сдвинута на  $\approx \vec{k} \cdot \vec{v}$ , где  $\vec{k}$  — волновой вектор света, а  $\vec{v}$  — скорость атома. Усредняя по всем скоростям атомов, как говорилось в задаче 3.6, мы получаем для  $I_F(\Delta)$  в пределе большой доплеровской ширины  $\gamma_0 \ll \Gamma_D$ <sup>1)</sup>:

$$I_F(\Delta) = I_F(0) e^{-\Delta^2 / \Gamma_D^2}. \quad (3.174)$$

В отличие от ранее рассмотренных механизмов однородного уширения, таких как обусловленные спонтанным распадом или полевым уширением, доплеровское уширение является примером *неоднородного* уширения — вероятность излучения и поглощения не одинакова для всех атомов.

Рассмотрим опять атомы со схемой энергетических уровней, показанной на рис. 3.7. Теперь, однако, будем предполагать, что атомы характеризуются тепловым распределением их скоростей. Если мы настроим узкополосное оптическое возбуждение на определенную частоту в пределах доплеровского контура, свет в основном будет взаимодействовать с группой атомов, чьи скорости таковы, что их доплеровские сдвиги отличаются на величину, меньшую однородного уширения. Такой набор атомов обычно называют *скоростной группой* (см. рис. 3.9).

Какова зависимость интенсивности флуоресценции от  $\kappa$  для такой доплеровски уширенной среды?

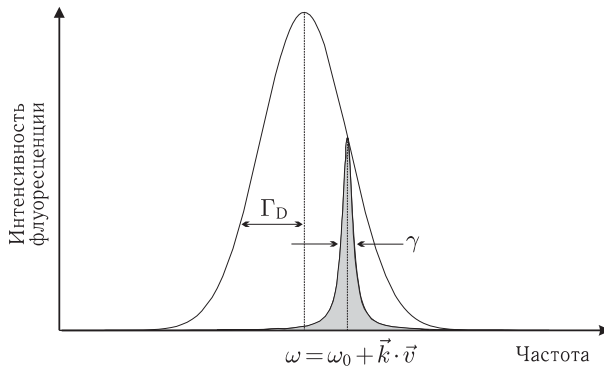


Рис. 3.9. Когда узкополосное возбуждающее излучение настроено на частоту  $\omega$  в пределах доплеровского контура, флуоресценция обязана группе атомов, скорости которых таковы, что их доплеровские сдвиги отличаются друг от друга меньше, чем на  $\gamma$

<sup>1)</sup> Более точное представление спектрального контура, принимающее во внимание механизмы однородного и неоднородного уширения, дается так называемым *контуром Фойхта*, который является сверткой лоренцева и гауссова контуров (см., например, [Demtröder (1996)] и [Khriplovich (1991)]).

**Решение**

Доля  $\delta N$  от полного числа атомов  $N_{\text{tot}}$ , с которой взаимодействует свет, равна

$$\delta N \sim \frac{\gamma}{\Gamma_D} N_{\text{tot}}, \quad (3.175)$$

где  $\gamma$  — однородная ширина линии. Для рассматриваемого случая  $\gamma$  — это «полевая» ширина линии, которая описывается выражением (3.173). В остальном кинетические уравнения для резонансной скоростной группы остаются такими же, как в п. (б), и мы имеем

$$I_F \propto \frac{\kappa}{1+\kappa} \delta N \propto \frac{\kappa}{\sqrt{1+\kappa}} \frac{\gamma_0}{\Gamma_D} N_{\text{tot}}. \quad (3.176)$$

Заметим, что в отличие от бездоплеровского случая, интенсивность флуоресценции продолжает расти ( $\propto \sqrt{\kappa}$ ) даже при  $\kappa \gg 1$ . Это продолжается до тех пор, пока  $\gamma_0 \sqrt{1+\kappa} \ll \Gamma_D$ . В противоположном пределе  $\gamma_0 \sqrt{1+\kappa} \gg \Gamma_D$  доплеровским уширением можно пренебречь.

### 3.8. Угловое распределение и поляризация атомной флуоресценции

Пусть атомная система приготовлена таким образом, что все атомы находятся на зеемановском подуровне  $M'_J = 1/2$  возбужденного состояния с угловым моментом  $J' = 1/2$ , из которого атомы спонтанно релаксируют в нижнее состояние с таким же моментом  $J = 1/2$ . При этом внешние поля отсутствуют.

(а) Каково угловое распределение интенсивности испускаемого света?

(б) Каково поляризационное состояние света, испускаемого в заданном направлении?

**Подсказка**

Полезно познакомиться со способами описания состояний поляризации света, приведенными в Приложении D.

**Решение**

(а) Пусть атомы располагаются в начале декартовой системы координат. Задача имеет цилиндрическую симметрию с выделенной осью, направленной по оси квантования ( $z$ ), поэтому достаточно рассмотреть излучение, распространяющееся в полуплоскости  $xz$  при  $x > 0$ . Следовательно, направление распространения света полностью определяется полярным углом  $\theta$  (рис. 3.10). При заданном  $\theta$  в качестве независимых ортогональных поляризаций могут быть выбраны  $\hat{e}_1 = \hat{y}$  и

$$\hat{e}_2 = \hat{\theta} \equiv \cos \theta \hat{x} - \sin \theta \hat{z}. \quad (3.177)$$

Эти два направления ортогональны направлению распространения света  $\hat{k}$  (рис. 3.10).



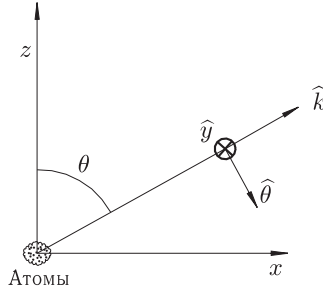


Рис. 3.10. Система координат для анализа атомной флуоресценции:  $\hat{k}$  — направление распространения света,  $\hat{y}$  (направлен по нормали к рисунку) и  $\hat{\theta}$  — ортогональные направления поляризации света. В силу цилиндрической симметрии задачи мы можем ограничить рассмотрение только плоскостью  $xz$

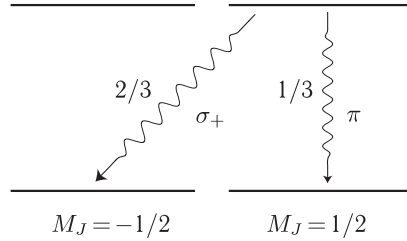


Рис. 3.11. Атомы возбужденного состояния  $J = 1/2$ ,  $M_J = 1/2$  могут распадаться на один из двух зеемановских подуровней нижнего состояния  $J = 1/2$  (соответственно  $\pi$ - и  $\sigma_+$ -излучение). Числа указывают относительные интенсивности излучения, пропорциональные квадратам соответствующих коэффициентов Клебша–Гордона

Имеется два канала распада возбужденного состояния (рис. 3.11). Амплитуда  $A$  излучения с заданной поляризацией  $\hat{\epsilon}$  при переходе в конечное состояние  $|J = 1/2, M_J\rangle$  имеет вид

$$A \propto \langle J = 1/2, M_J | \hat{\epsilon} \cdot \vec{r} | J' = 1/2, M'_J = 1/2 \rangle. \quad (3.178)$$

Согласно теореме Вигнера–Эккарта (Приложение F) только сферическая компонента  $\hat{\epsilon}$  с  $q = 0$  вносит вклад в амплитуду  $A$  для распада в состояние  $M_J = 1/2$  и только компонента  $\hat{\epsilon}$  с  $q = +1$ , которая соответствует составляющей  $q = -1$  вектора  $\vec{r}$ , см. формулу (F.30) Приложения F, вносит вклад в амплитуду  $A$  для распада в состояние  $M_J = -1/2$ . Амплитуда  $A$  пропорциональна соответствующим коэффициентам Клебша–Гордона, которые равны

$$\langle 1/2, 1/2, 1, -1 | 1/2, -1/2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad (3.179)$$

для  $\sigma_+$ -излучения и

$$\langle 1/2, 1/2, 1, 0 | 1/2, 1/2 \rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \quad (3.180)$$

для  $\pi$ -излучения.

Рассмотрим сначала излучение  $\pi$ -поляризации. В классической картине такое излучение создается диполем, осциллирующим вдоль направления  $z$  (на частоте перехода). Таким образом, можно ожидать, что это излучение будет иметь максимальную величину при  $\theta = \pi/2$  и что интенсивность излучения обратится в ноль в направлении оси  $z$  ( $\theta = 0, \pi$ ). Эти ожидания подтверждаются точными расчетами. Интенсивность излучения с данным вектором поляризации при заданном значении угла  $\theta$  (определенными выше) пропорциональна квадрату скалярного произведения соответствующего вектора поляризации и вектора  $\hat{z}$ :

$$I_y^{(\pi)}(\theta) \propto |\hat{y} \cdot \hat{z}|^2 = 0; \quad (3.181)$$

$$I_\theta^{(\pi)}(\theta) \propto |\hat{\theta} \cdot \hat{z}|^2 = |(\cos \theta \hat{x} - \sin \theta \hat{z}) \cdot \hat{z}|^2 = \sin^2 \theta. \quad (3.182)$$

И, следовательно, полная интенсивность  $I_{\text{tot}}^{(\pi)}(\theta) \propto \sin^2 \theta$ .

Рассмотрим теперь  $\sigma_+$ -излучение. В классической картине такое излучение создается диполем, вращающимся (а не осциллирующим) в плоскости  $xy$ . Мы можем, следовательно, ожидать, что максимальная интенсивность излучения будет наблюдаться вдоль направления  $\theta = 0, \pi$ , тогда как в экваториальной плоскости ( $\theta = \pi/2$ ) интенсивность излучения должна быть вдвое меньше. (Это можно объяснить тем, что круговое движение диполя может быть разложено на две линейные ортогональные осцилляции, из которых только одна видна в экваториальной плоскости). Эти ожидания опять же подтверждаются расчетами. Используя вектор поляризации для  $\sigma_+$ -излучения в виде

$$\hat{\epsilon}_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{y}), \quad (3.183)$$

мы получаем

$$I_y^{(\sigma)}(\theta) \propto |\hat{y} \cdot \hat{\epsilon}_+|^2 = \left| \hat{y} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{y}) \right|^2 = \frac{1}{2}; \quad (3.184)$$

$$I_\theta^{(\sigma)}(\theta) \propto |\hat{\theta} \cdot \hat{\epsilon}_+|^2 = \left| (\cos \theta \hat{x} - \sin \theta \hat{z}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{y}) \right|^2 = \frac{\cos^2 \theta}{2}. \quad (3.185)$$

Полная интенсивность  $\sigma$ -излучения дается выражением

$$I_{\text{tot}}^{(\sigma)}(\theta) \propto I_y^{(\sigma)}(\theta) + I_\theta^{(\sigma)}(\theta) = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2}. \quad (3.186)$$

Заметим, что здесь мы сразу складываем интенсивности, а не исходим из суммы амплитуд, поскольку ортогональные поляризации не интерферируют (в том смысле, что в выражении для квадрата модуля амплитуд перекрестный член равен нулю, поскольку содержит скалярное произведение ортогональных ортов).

Чтобы найти полную интенсивность излучения в заданном направлении, мы должны сложить два вклада:  $I_{\text{tot}}^{(\pi)}(\theta)$  и  $I_{\text{tot}}^{(\sigma)}(\theta)$ , с весами, равными полным вероятностям соответствующих составляющих излучения ( $1/3$  и  $2/3$  соответственно). Полученный результат не зависит от  $\theta$ , что означает, что по интенсивности свет испускается атомом изотропно.

Нормированные угловые распределения для  $\pi$ - и  $\sigma$ -поляризованного света и полное изотропное распределение интенсивности показаны на рис. 3.12.

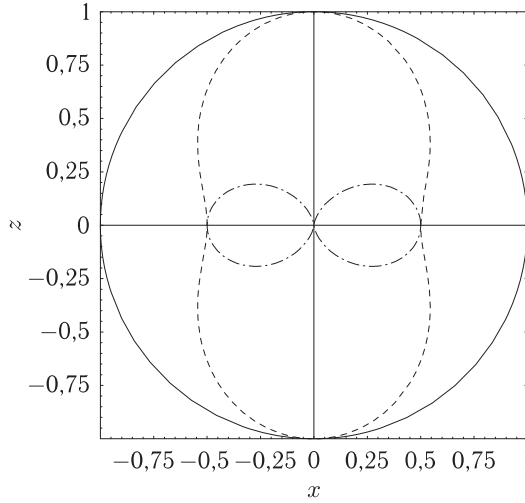


Рис. 3.12. Нормированное угловое распределение интенсивности флуоресценции для  $\pi$ -излучения (штрих-пунктирная линия), для  $\sigma$ -излучения (штриховая линия) и для полной интенсивности (сплошная линия), которая в данном случае изотропна

**(б)** Даже без всяких расчетов ясно, что при  $\theta = 0$  или  $\pi$  наблюдается только  $\sigma$ -излучение, и, следовательно, свет в этих направлениях является полностью циркулярно поляризованным. В экваториальной плоскости ( $\theta = \pi/2$ ) наблюдаются в равных долях независимые вклады вертикально поляризованного ( $\pi$ ) и горизонтально поляризованного ( $\sigma$ ) света, так что излучение является неполяризованным.

При произвольном значении  $\theta$  поляризатор, ориентированный горизонтально (вдоль  $\hat{y}$ ), будет пропускать половину интенсивности  $\sigma$ -излучения, тогда как поляризатор, ориентированный вертикально (вдоль  $\hat{\theta}$ ), будет пропускать долю интенсивности  $\propto (\cos^2 \theta)/2$  от  $\sigma$ -излучения и долю  $\propto (\sin^2 \theta)/2$  от  $\pi$ -излучения. Таким образом для первого параметра Стокса (Приложение D) мы имеем

$$S_1 = \frac{I_x - I_y}{I_0} = \frac{1 - \cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{2} = 0. \quad (3.187)$$

Из соображений симметрии также ясно, что  $S_2 = 0$ . Линейно поляризованный  $\pi$ -свет не может вносить вклад в  $S_3$ . Из обсуждения, приведенного в п. (а) (в частности, из соотношений (3.184) и (3.185)) очевидно, что векторная амплитуда  $\sigma_+$ -излучения, испущенного в заданном направлении, может быть записана в виде

$$-\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{y} - \frac{\cos \theta}{\sqrt{2}} \hat{\theta} \propto \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{y} - i \cos \theta \hat{\theta}), \quad (3.188)$$

где мы исключили общий фазовый множитель. Вычисляя скалярное произведение этой амплитуды с амплитудами векторов

$$\hat{\epsilon}'_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{y} + i \hat{\theta}) \quad (3.189)$$

для левой циркулярной поляризации <sup>1)</sup> и

$$\hat{\epsilon}'_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{y} - i\hat{\theta}) \quad (3.190)$$

для правой циркулярной поляризации, мы получаем

$$S_3 = \frac{I_+ - I_-}{I_0} = \frac{(1 + \cos \theta)^2 - (1 - \cos \theta)^2}{4} = \cos \theta. \quad (3.191)$$

Отсюда следует, что свет, испущенный в направлении  $\theta = 0$ , поляризован по левому кругу, а свет, испущенный вдоль направления  $\theta = \pi$ , поляризован по правому кругу. Степень поляризации  $p = |\cos \theta|$ , в согласии с нашими качественными соображениями, приведенными выше.

### 3.9. Изменения поглощения при оптической накачке

Для электрических дипольных ( $E1$ ) переходов  $J = 1 \rightarrow J'$  (с  $J' = 0, 1, 2$ ) найти относительные изменения населенностей зеемановских подуровней состояния  $J = 1$ , обусловленные оптической накачкой линейно поляризованным светом (за ось квантования принять направление поляризации света, т.е. направление  $\pi$ -поляризации <sup>2)</sup>). Будем считать, что переход является «замкнутым» (т.е. атомы, возбужденные на верхний уровень, могут при распаде возвращаться только назад на нижний уровень), что возбуждающий свет является резонансным, что среда является оптически тонкой, и что, для упрощения расчетов, параметр насыщения  $\kappa$  (см. задачу 3.7) много меньше единицы. Предполагаем также, что скорость релаксации  $\gamma_{\text{rel}}$  между зеемановскими подуровнями основного состояния много меньше, чем  $\gamma_0$ , где  $\gamma_0$  — скорость спонтанного распада (задача 3.3).

Убедиться в том, что для случаев  $J = 1 \rightarrow J' = 0, 1$  оптическая накачка ведет к уменьшению дальнейшего поглощения света средой, тогда как в случае  $J = 1 \rightarrow J' = 2$  происходит обратный процесс: в результате оптической накачки поглощение растет. Это общее свойство переходов  $J \rightarrow J + 1$  (в отличие от переходов  $J \rightarrow J - 1, J$ ), которое справедливо для произвольной поляризации света [Kazantsev и др. (1985)]. Отметим, что хотя мы в этой задаче полагали  $\kappa$  малым, качественный вывод о том, что оптическая накачка уменьшает поглощение для переходов  $J \rightarrow J - 1, J$  и увеличивает поглощение для переходов  $J \rightarrow J + 1$ , справедлив при любом  $\kappa$ .

#### Решение

Как это часто бывает, чтобы разобраться в сути эффекта, полезно обратиться к аналогичной задаче, имеющей простое решение. Рассмотрим оптическую накачку

<sup>1)</sup> Векторы циркулярных поляризаций  $\hat{\epsilon}'_+$  и  $\hat{\epsilon}'_-$  по определению ортогональны вектору  $\hat{k}$ , и мы определяем  $\hat{y}$  как горизонтальное направление, а  $-\hat{\theta}$  — как вертикальное направление при построении правой системы координат (ср. с формулой (3.183)).

<sup>2)</sup> При этом предполагается, что магнитное поле равно нулю или совпадает по направлению с вектором поляризации света (условие «спектроскопической стабильности» Гейзенберга; см. Митчелл А. и Земанский М. Резонансное излучение и возбужденные атомы. Л.: ОНТИ, 1937. 285 с.). Если это условие не выполняется, то результат воздействия света на систему атомов существенно зависит от угла между векторами поляризации и напряженности магнитного поля, а также от соотношения интенсивности света и напряженности поля. — *Примеч. ред.*

циркулярно поляризованным светом в пределе больших насыщений  $\kappa$ . (Как отмечено при постановке задачи, качественный результат не зависит от поляризации света и справедлив при любом  $\kappa$ ). Из рис. 3.13 видно, что при переходах  $1 \rightarrow 0, 1$  атомы оказываются в состояниях, которые не поглощают свет (в так называемых *темных состояниях*). Однако, при переходе  $1 \rightarrow 2$  атомы перекачиваются в состояние, которое свет поглощает (*светлое состояние*).

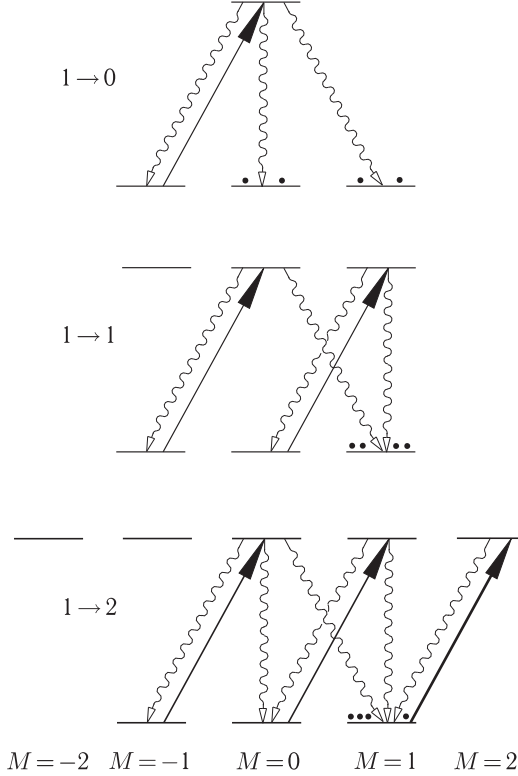


Рис. 3.13. Иллюстрация влияния оптической накачки  $\sigma_+$  (левоциркулярно поляризованным) светом на населенности зеемановских подуровней основного состояния для замкнутых переходов  $J = 1 \rightarrow J' = 0, 1, 2$

Согласно результатам задачи 3.4, скорость поглощения пропорциональна квадрату коэффициента Клебша–Гордона, описывающему связь между верхним и нижним состояниями. Для перехода  $J = 1 \rightarrow J' = 2$  и для  $\sigma_+$ -поляризации соответствующие коэффициенты Клебша–Гордона имеют вид

$$\langle J, M, 1, 1 | J', M' = M + 1 \rangle^2 = \frac{1}{6} \quad (|1, -1\rangle \rightarrow |2, 0\rangle), \quad (3.192)$$

$$= \frac{1}{2} \quad (|1, 0\rangle \rightarrow |2, 1\rangle), \quad (3.193)$$

$$= 1 \quad (|1, 1\rangle \rightarrow |2, 2\rangle). \quad (3.194)$$

Таким образом, атомы перекачиваются в состояние, сильно взаимодействующее со световым полем, в результате чего поглощение возрастает!

Прежде чем переходить к рассмотрению конкретных ситуаций, мы очертим общий подход к проблеме. Наша первая задача состоит в том, чтобы понять, каким образом свет перераспределяет населенности по различным зеемановским подуровням основного состояния, что, в общем случае, не просто. Чтобы найти плотность атомов  $\rho_g(M)$ , находящихся на конкретном подуровне  $|J, M\rangle$  основного состояния, мы должны определить скорость, с которой происходит возбуждение атомов из состояния  $|J, M\rangle$ , и поток атомов  $F_{\text{sp}}(M)$ , распадающихся назад в  $|J, M\rangle$  через канал спонтанного излучения из всех зеемановских подуровней возбужденного состояния  $|J', M'\rangle$  (чьи населенности  $\rho_e(M')$  зависят от населенностей и скоростей возбуждения других подуровней основного состояния).

Основное кинетическое уравнение для заданного зеемановского подуровня основного состояния имеет вид

$$\frac{d\rho_g(M)}{dt} = -W_{eg}(M)\rho_g(M) + F_{\text{sp}}(M) + \gamma_{\text{rel}}[\rho_g(\text{avg}) - \rho_g(M)], \quad (3.195)$$

где  $W_{eg}(M)$  — скорость возбуждения с заданного подуровня  $|J, M\rangle$  основного состояния для  $\pi$ -поляризованного света, а  $\rho_g(\text{avg})$  — средняя населенность зеемановского подуровня. В равновесии  $d\rho_g(M)/dt = 0$ , имеем

$$\rho_g(M) = \frac{F_{\text{sp}}(M) + \gamma_{\text{rel}}\rho_g(\text{avg})}{W_{eg}(M) + \gamma_{\text{rel}}}. \quad (3.196)$$

Из условия  $\kappa \ll 1$  следует, что скорость возбуждения существенно уступает скорости релаксации по подуровням основного состояния  $\gamma_{\text{rel}}$ , следовательно

$$\rho_g(M) \approx \rho_g(\text{avg}) + \frac{F_{\text{sp}}(M)}{\gamma_{\text{rel}}} - \frac{W_{eg}(M)}{\gamma_{\text{rel}}}. \quad (3.197)$$

Из результатов задачи 3.4 (уравнение (3.132)) видно, что скорость возбуждения  $W_{eg}(M)$  для  $\pi$ -поляризации имеет вид

$$W_{eg}(M) = \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0} \frac{\langle J, M, 1, 0 | J', M' \rangle^2}{2J' + 1}, \quad (3.198)$$

где мы воспользовались тем фактом, что для  $\pi$ -поляризованного света коэффициенты Клебша–Гордона отличны от нуля только при  $M = M'$  (напомним, что принято  $\hbar = 1$ ).

Поток атомов  $F_{\text{sp}}(M)$ , спонтанно распадающихся назад в состояние  $|J, M\rangle$ , дается выражением

$$F_{\text{sp}}(M) = \gamma_0 \frac{2J' + 1}{2J + 1} \sum_{M'} \sum_q \rho_e(M') \langle J', M', 1, q | J, M \rangle^2, \quad (3.199)$$

где  $q = 1, 0, -1$  учитывает все возможные поляризации спонтанно испускаемых фотонов. При  $\kappa \ll 1$  мы можем использовать фактически тот же подход, который мы применяли в п. (б) задачи 3.6, чтобы убедиться в том, что населенность возбужденного состояния  $\rho_e(M')$  приближенно описывается выражениями

$$\rho_e(M') \approx \rho_g(M') \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0^2} \frac{\langle J, M', 1, 0 | J', M' \rangle^2}{2J' + 1} \approx \quad (3.200)$$

$$\approx \rho_g(\text{avg}) \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0^2} \frac{\langle J, M', 1, 0 | J', M' \rangle^2}{2J' + 1}, \quad (3.201)$$

где мы приняли, что полная населенность основного состояния не меняется заметным образом, поскольку величина  $\kappa$  мала. Следовательно,

$$F_{\text{sp}}(M) \approx \rho_g(\text{avg}) \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0(2J+1)} \sum_{M'} \sum_q \langle J, M', 1, 0 | J', M' \rangle^2 \langle J', M', 1, q | J, M \rangle^2. \quad (3.202)$$

Из соотношений (3.197), (3.198) и (3.202) видно, что относительное изменение населенностей зеемановских подуровней основного состояния

$$\delta\rho_g(M) = \frac{\rho_g(M) - \rho_g(\text{avg})}{\rho_g(\text{avg})} \quad (3.203)$$

описывается выражением

$$\delta\rho_g(M) \approx \kappa \left[ \left( \sum_{M'} \sum_q \frac{\langle J, M', 1, 0 | J', M' \rangle^2 \langle J', M', 1, q | J, M \rangle^2}{2J+1} \right) - \frac{\langle J, M, 1, 0 | J', M \rangle^2}{2J'+1} \right], \quad (3.204)$$

где параметр насыщения в данном случае равен

$$\kappa \equiv \frac{|\langle e, J' || d || g, J \rangle|^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0 \gamma_{\text{rel}}}. \quad (3.205)$$

Теперь мы готовы рассматривать конкретные случаи.

**Случай перехода  $1 \rightarrow 0$ .** Поскольку в данном случае существует только один зеемановский подуровень возбужденного состояния, только один из зеемановских подуровней основного состояния, а именно  $M = 0$ , взаимодействует со светом накачки (см. рис. 3.14). Атомы, возбуждаемые на верхний уровень, распадаются равновероятно на все подуровни основного состояния. Это можно получить из факта изотропности пространства, поскольку атомы в состоянии  $|0, 0\rangle$  деполяризованы, и спонтанное излучение не может создать поляризацию, которая отсутствует первоначально (в противном случае вакуум, который индуцирует спонтанное излучение (задачи 3.2 и 3.3), имел бы выделенное направление!). Следовательно, процесс оптической накачки должен уменьшать населенность  $\rho_g(0)$  и увеличивать населенности  $\rho_g(\pm 1)$ .

Эти соображения легко подтвердить, пользуясь формулой (3.204):

$$\delta\rho_g(0) \approx -\frac{2\kappa}{9}, \quad (3.206)$$

$$\delta\rho_g(\pm 1) \approx +\frac{\kappa}{9}. \quad (3.207)$$

Очевидно, что оптическая накачка приводит к уменьшения поглощения света накачки в случае перехода  $1 \rightarrow 0$ , поскольку населенность единственного зеемановского подуровня основного состояния, который взаимодействует со светом (*светлое состояние*), уменьшается, тогда как населенности состояний, которые не взаимодействуют со светом (*темные состояния*), растут.

**Случай перехода  $1 \rightarrow 1$ .** В этом случае два подуровня основного состояния ( $M = 1$  и  $M = -1$ ) взаимодействуют со светом накачки, тогда как подуровень  $M = 0$  — это темное состояние (рис. 3.14). Переход  $|J = 1, M = 0\rangle \rightarrow |J' = 1, M' = 0\rangle$  запрещен, поскольку коэффициент Клебша–Гордона  $\langle 1, 0, 1, 0 | 1, 0 \rangle$  обращается в ноль (соответствующий вывод и объяснения содержатся в задаче 9.5). Скорости переходов из подуровней  $M = 1$  и  $M = -1$  основного состояния одинаковы, и существует определенная вероятность, что атомы, переведенные в возбужденные состояния, распадутся в темное состояние  $|J = 1, M = 0\rangle$ . Таким образом, оптическая накачка в этом случае также снижает поглощение.

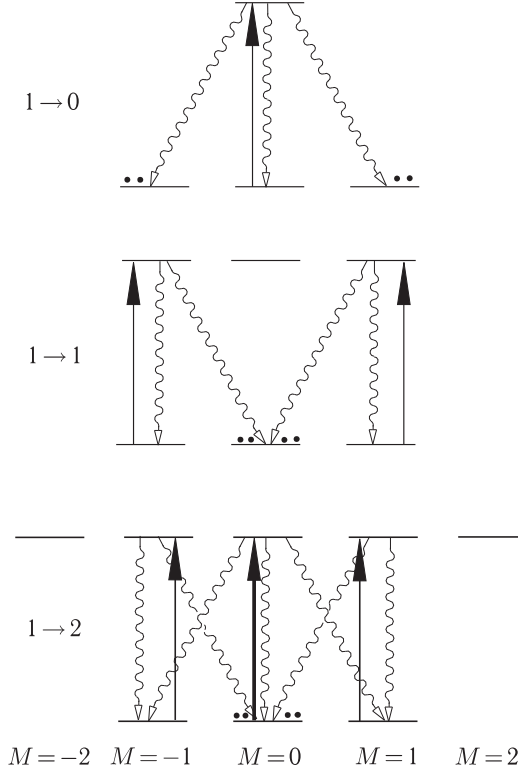


Рис. 3.14. Иллюстрация влияния оптической накачки линейно поляризованным ( $\pi$ ) светом на населенности зеемановских подуровней основного состояния для замкнутых переходов  $J = 1 \rightarrow J' = 0, 1, 2$

Как и прежде, выражение (3.204) подтверждает наш интуитивный аргумент:

$$\delta\rho_g(0) \approx +\frac{\kappa}{6}, \quad (3.208)$$

$$\delta\rho_g(\pm 1) \approx -\frac{\kappa}{12}. \quad (3.209)$$

**Случай перехода  $1 \rightarrow 2$ .** В этом случае все три зеемановских подуровня основного состояния взаимодействуют со светом накачки, т.е., темные состояния отсутствуют. Сила взаимодействия со светом накачки различна для различных



состояний, как можно видеть из сравнения соответствующих коэффициентов Клебша–Гордона. Эта ситуация существенным образом усложнена, так что следует обратиться к формуле (3.204). Используя ее, мы легко вычисляем относительные изменения населенностей основного состояния:

$$\delta\rho_g(0) \approx +\frac{\kappa}{18}, \quad (3.210)$$

$$\delta\rho_g(\pm 1) \approx -\frac{\kappa}{36}. \quad (3.211)$$

Мы видим, что населенность зеemanовского подуровня основного состояния  $M = 0$  возрастает, тогда как населенности других подуровней падают.

Из формулы (3.98) видно, что чем больше квадрат коэффициента Клебша–Гордона  $\langle J, M, 1, 0 | J', M \rangle^2$ , тем выше скорость поглощения. Если подсчитать коэффициенты Клебша–Гордона для перехода  $1 \rightarrow 2$ , то обнаружится, что подуровень  $M = 0$  имеет максимальную скорость поглощения. Следовательно, в отличие от случая переходов  $1 \rightarrow 0$  и  $1 \rightarrow 1$ , оптическая накачка в данном случае увеличивает поглощение света точно так же, как и для случая циркулярно поляризованного света <sup>1)</sup>.

Заметим, что вследствие эффектов, рассмотренных в этой задаче, замкнутые переходы  $J \rightarrow J + 1$  «просветляются» только тогда, когда поток поглощенных фотонов сравнивается с потоком фотонов, рожденных в процессе вынужденного испускания, т. е. когда

$$\frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0^2} \sim 1. \quad (3.212)$$

В этом состоит отличие этого случая от случая переходов  $J \rightarrow J - 1, J$ , которые просветляются, когда все атомы переведены накачкой в темные состояния, т. е. когда

$$\frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0 \gamma_{\text{rel}}} \sim 1. \quad (3.213)$$

### 3.10. Оптическая накачка и матрица плотности

Пусть атомы, первоначально находящиеся в неполяризованном основном состоянии с  $J = 3/2$ , подвергаются оптической накачке светом, почти резонансным переходу в возбужденное состояние с  $J' = 1/2$ . Предполагая, что все атомы, возбужденные в состояние  $J' = 1/2$ , распадаются в некое не взаимодействующее

<sup>1)</sup> Этот вывод об увеличении поглощения света при оптической накачке на переходе  $J \rightarrow J + 1$  справедлив при неявно предполагавшемся условии о том, что в возбужденном состоянии скорость релаксации по подуровням с различными проекциями момента  $M'$  много меньше, чем скорость спонтанного излучения  $\gamma_0$ . Это условие не выполняется при широко распространенной оптической накачке в кюветах с «буферным» газом, в которых возбужденный атом за время жизни из-за столкновений с частицами газа полностью теряет «память» о поляризации возбуждающего света и испускает свет изотропно. При этом стационарное распределение населенностей подуровней основного состояния различается только в меру различия вероятностей возбуждения, а установившееся поглощение оказывается всегда *меньше* исходного — так же, как и в случаях  $J \rightarrow J - 1, J$ . — *Примеч. ред.*

со светом состояние, не возвращаясь в основное <sup>1)</sup>, и что всеми другими процессами релаксации можно пренебречь, найти  $4 \times 4$  матрицу, описывающую зеемановские подуровни состояния  $J = 3/2$  после завершения процесса оптической накачки (более детально о матрице плотности, а также о *поляризационных моментах*, создаваемых оптической накачкой в рассматриваемом случае, см. в Приложении G). Рассмотрим следующие случаи поляризации света:

- (а) левая циркулярная поляризация ( $\sigma_+$ ),
- (б) линейная поляризация вдоль  $z$ ,
- (в) линейная поляризация вдоль  $x$ .

### Решение

(а) В этом случае состояния с  $M_J = -3/2$  и  $M_J = -1/2$  будут полностью выкачаны, а оставшиеся два подуровня никак не будут затрагиваться оптической накачкой (рис. 3.15). Выбирая нормировку таким образом, чтобы начальная населенность для каждого зеемановского подуровня была равна единице, мы можем написать для конечной матрицы основного состояния

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.214)$$

где индексы матрицы соответствуют компонентам  $M_J$  в порядке понижения.

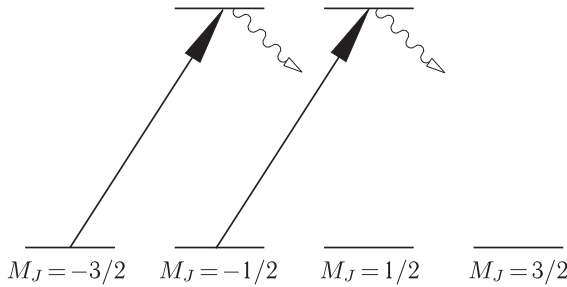


Рис. 3.15. Оптическая накачка перехода  $J = 3/2 \rightarrow J' = 1/2$  при циркулярно поляризованной накачке

(б) В этом случае свет соединяет состояния с  $M_J = M'_J$ , поэтому состояния  $M_J = \pm 1/2$  опустошаются (рис. 3.16). Таким образом, для окончательной матрицы плотности основного состояния мы имеем

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.215)$$

<sup>1)</sup> Несмотря на искусственность этого допущения, оно, по существу, моделирует ситуацию полной утраты верхним состоянием памяти об анизотропии возбуждения (см. предыдущую сноску). — *Примеч. ред.*

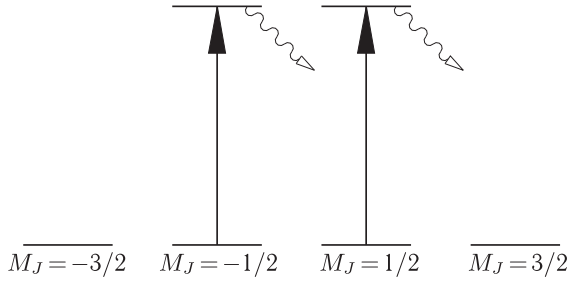


Рис. 3.16. Оптическая накачка перехода  $J = 3/2 \rightarrow J' = 1/2$  при линейно поляризованной накачке

(в) Здесь достаточно заметить, что все атомы выкачиваются из основного состояния, за исключением находящихся в двух возможных  $x$ -непоглощающих состояниях ( $|\psi_d^\pm\rangle$ ), образующихся при когерентной суперпозиции пар подуровней  $M_J = -3/2$ ,  $M_J = 1/2$  и  $M_J = -1/2$ ,  $M_J = 3/2$  (рис. 3.17). Этот эффект, когда населенность остается в суперпозиции зеемановских подуровней, несмотря на то что все зеемановские подуровни связаны со световым полем, известен как *эффект когерентного пленения населенностей*. Как будет видно, несмотря на такое изысканное название, единственное различие между этим случаем и случаем, рассмотренным в п. (б) этой задачи, состоит в выборе оси квантования <sup>1)</sup>.

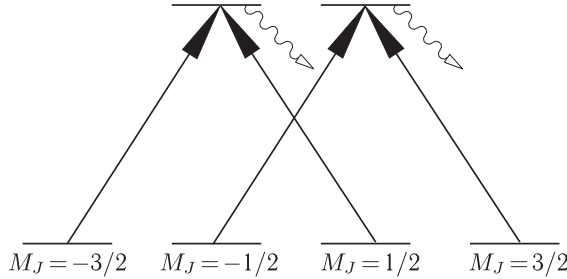


Рис. 3.17. Оптическая накачка перехода  $J = 3/2 \rightarrow J' = 1/2$  при  $x$ -поляризованной накачке

Атом находится в темном состоянии  $|\psi_d\rangle$ , когда амплитуды  $E1$  возбуждения в верхнее состояние равны нулю, т. е.

$$\langle J' = 1/2, M_J' = \pm 1/2 | e\mathcal{E}(t)\vec{r} \cdot \hat{\varepsilon} | \psi_d \rangle = 0. \quad (3.216)$$

Здесь  $H = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t) = e\mathcal{E}(t)\vec{r} \cdot \hat{\varepsilon}$  — гамильтониан, описывающий взаимодействие света со средой,  $\hat{\varepsilon}$  — вектор поляризации света, и для  $M_J' = 1/2$  получаем

$$|\psi_d^+\rangle = C_{-1/2}|J = 3/2, M_J = -1/2\rangle + C_{3/2}|J = 3/2, M_J = 3/2\rangle, \quad (3.217)$$

<sup>1)</sup> Это утверждение справедливо в отсутствие магнитного поля (точнее, при условии, что частота зеемановского расщепления уровней основного состояния много меньше средней частоты оптического возбуждения атомов). — *Примеч. ред.*

а для  $M'_J = -1/2$

$$|\psi_d^-\rangle = C_{-3/2}|J = 3/2, M_J = -3/2\rangle + C_{1/2}|J = 3/2, M_J = 1/2\rangle. \quad (3.218)$$

Гамильтониан взаимодействия можно выразить через сферические тензоры, чтобы воспользоваться теоремой Вигнера–Эккарта (Приложение F). В этом случае  $\hat{\varepsilon} = \hat{x}$ , и мы можем использовать выражения (F.23) и (F.25) чтобы написать

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(r_- - r_+), \quad (3.219)$$

и в результате имеем

$$H = \frac{e\mathcal{E}(t)}{\sqrt{2}}(r_- - r_+), \quad (3.220)$$

где  $r_{\pm}$  — компоненты  $q = \pm 1$  векторного оператора  $\vec{r}$  в сферическом базисе.

Возвращаясь к соотношению (3.216) и пользуясь теоремой Вигнера–Эккарта (F.1)

$$\langle J', M'_J | r_{\pm} | J, M_J \rangle = \frac{\langle J' || r || J \rangle}{\sqrt{2J' + 1}} \langle J, M_J, 1, \pm 1 | J', M'_J \rangle \quad (3.221)$$

вместе с формулами (3.217) и (3.218), получаем условия

$$\langle 3/2, 3/2, 1, -1 | 1/2, 1/2 \rangle C_{3/2} - \langle 3/2, -1/2, 1, 1 | 1/2, 1/2 \rangle C_{-1/2} = 0, \quad (3.222)$$

$$\langle 3/2, 1/2, 1, -1 | 1/2, -1/2 \rangle C_{1/2} - \langle 3/2, -3/2, 1, 1 | 1/2, -1/2 \rangle C_{-3/2} = 0. \quad (3.223)$$

Эти коэффициенты Клебша–Гордона имеют следующие значения:

$$\langle 3/2, 3/2, 1, -1 | 1/2, 1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.224)$$

$$\langle 3/2, -1/2, 1, 1 | 1/2, 1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad (3.225)$$

$$\langle 3/2, 1/2, 1, -1 | 1/2, -1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad (3.226)$$

$$\langle 3/2, -3/2, 1, 1 | 1/2, -1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.227)$$

откуда мы имеем

$$C_{-1/2} = C_{3/2}\sqrt{3}, \quad (3.228)$$

$$C_{1/2} = C_{-3/2}\sqrt{3}. \quad (3.229)$$

Мы можем также построить две линейные комбинации зеемановских подуровней, которые ортогональны темным состояниям  $|\psi_d^{\pm}\rangle$ ; это будут светлые состояния, которые, по аналогии с п. (б), будут полностью опустошены при оптической накачке. Мы можем найти правильную нормировку для матрицы плотности, используя тот

факт, что каждое из темных состояний имеет единичную населенность как до, так и после оптической накачки. В результате мы находим

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 & 3 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.230)$$

Мы знаем, что это решение может быть также получено путем вращения матрицы плотности, приведенной в п. (б), на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $y$  (используя соответствующую матрицу квантово-механического вращения (см. Приложение Е). Действительно, темные состояния  $|\psi_d^\pm\rangle$  могут быть легко найдены путем применения такого вращения к состояниям  $|J = 3/2, M_J = \pm 3/2\rangle$ .

### 3.11. Каскадный распад

Рассмотрим атом, имеющий возбужденное состояние  $|a\rangle$  той же четности, что и основное состояние  $|g\rangle$  (рис. 3.18), которое распадается в состояние противоположной четности  $|b\rangle$ , которое, в свою очередь, распадается в основное состояние. Пусть в начальный момент времени состояния  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  не заселены. Затем, в момент времени  $t = t_0$  состояние  $|a\rangle$  мгновенно заселяется. Допустим также, что в эксперименте регистрируется флуоресценция перехода  $|b\rangle \rightarrow |g\rangle$  и система регистрации нечувствительна к флуоресценции на длине волны перехода  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ .

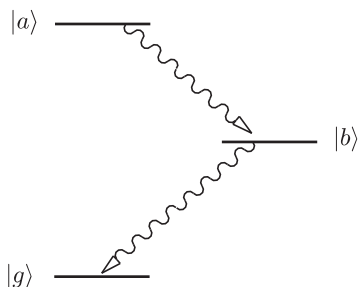


Рис. 3.18. Уровни и переходы, участвующие в каскадном распаде (см. текст)

(а) Получить выражение для временной зависимости сигнала флуоресценции через времена жизни состояний  $|b\rangle$  и  $|a\rangle$  (соответственно  $\tau_b$  и  $\tau_a$ ).

(б) Проанализировать предельные случаи  $\tau_a \gg \tau_b$ ,  $\tau_a \ll \tau_b$  и  $\tau_a \approx \tau_b$ .

(в) Изменяются ли результаты анализа, если состояние  $|a\rangle$  обладает дополнительными каналами релаксации в состояния, отличные от  $|b\rangle$ ?

(г) Рисунок 3.19 показывает реальные результаты эксперимента с атомным диспрозием [Budker и др. (1994)]. Состояние  $|a\rangle$  ( $E = 19797,96 \text{ см}^{-1}$ ) заселялось последовательностью двух коротких (длительностью  $\sim 7 \text{ нс}$ ) лазерных импульсов<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Два лазерных импульса различных длин волн обеспечивали ступенчатое заселение состояния  $|a\rangle$  из основного состояния. Длительность импульсов и интервал между ними были много короче времен жизни состояний изучаемого каскада. — *Примеч. ред.*

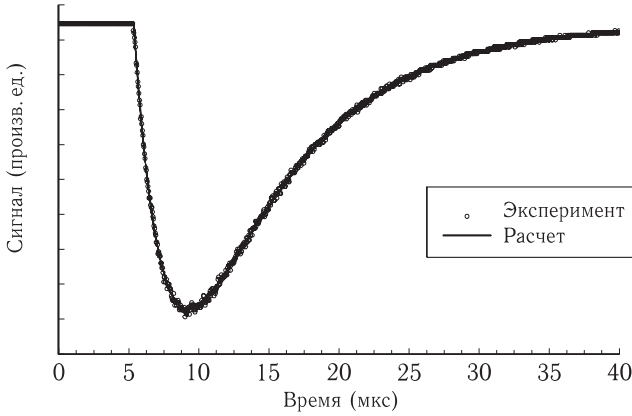


Рис. 3.19. Интенсивность флуоресценции перехода  $|b\rangle \rightarrow |g\rangle$  атома Ду как функция времени (Пик флуоресценции на рисунке перевернут, поскольку выходной сигнал фотоумножителя имеет отрицательную полярность)

Флуоресценция перехода  $|b\rangle \rightarrow |g\rangle$  (564 нм) выделялась с помощью интерференционного фильтра и регистрировалась с помощью быстрого фотоумножителя. Экспериментальные точки на рисунке аппроксимировались ожидаемой временной зависимостью (полученной в п. (а) этой задачи); в качестве свободных параметров использовались  $t_0$ , полная амплитуда сигнала,  $\tau_a$  и  $\tau_b$ . Используя приведенный рисунок, определить  $\tau_a$  и  $\tau_b$ .

### Решение

(а) Обозначим населенности состояний  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  соответственно  $\rho_a$  и  $\rho_b$ . Населенность состояния  $|a\rangle$  экспоненциально уменьшается вследствие спонтанного излучательного перехода в состояние  $|b\rangle$ . Следовательно

$$\rho_a(t) = \rho_a(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau_a}. \quad (3.231)$$

Дифференциальное уравнение, описывающее временную зависимость  $\rho_b(t)$ , имеет член, описывающий динамику населенности состояния  $|b\rangle$  через спонтанное излучение из состояния  $|a\rangle$  и сток населенности из  $|b\rangle$  через распад в основное состояние:

$$\dot{\rho}_b(t) = -\dot{\rho}_a(t) - \frac{\rho_b}{\tau_b} = \rho_a(t_0)\frac{e^{-(t-t_0)/\tau_a}}{\tau_a} - \frac{\rho_b}{\tau_b}. \quad (3.232)$$

Уравнение (3.232) это линейное неоднородное дифференциальное уравнение. Его решением является сумма общего решения однородного уравнения

$$\dot{\rho}_b(t) = -\frac{\rho_b}{\tau_b} \quad (3.233)$$

и частного решения уравнения (3.232). Последнее может быть найдено, приписывая  $\rho_b(t)$  временную зависимость вида  $e^{-(t-t_0)/\tau_a}$ . Постоянные множители в решении уравнения (3.232) определяются начальными условиями  $\rho_b(t_0) = 0$  и  $\dot{\rho}_b(t_0) = -\dot{\rho}_a(t_0)/\tau_a$ . В результате приходим к следующему выражению для  $\rho_b(t)$ :

$$\rho_b(t) = \frac{\tau_b}{\tau_a - \tau_b} \rho_a(t_0) (e^{-(t-t_0)/\tau_a} - e^{-(t-t_0)/\tau_b}). \quad (3.234)$$

Сигнал флуоресценции  $\mathcal{F}$ , наблюдаемый экспериментально, пропорционален скорости, с которой каждый атом возвращается в основное состояние из состояния  $|b\rangle$  (это — число фотонов в секунду, испускаемых на переходе  $|b\rangle \rightarrow |g\rangle$ ):

$$\mathcal{F} \propto \frac{\rho_b(t)}{\tau_b} = \frac{\rho_a(t_0)}{\tau_a - \tau_b} (e^{-(t-t_0)/\tau_a} - e^{-(t-t_0)/\tau_b}). \quad (3.235)$$

**(б)** Если  $\tau_a \ll \tau_b$ , то атомы быстро (за времена  $\sim \tau_a$ ) распадаются в состояние  $|b\rangle$ , и задний фронт импульса флуоресценции будет иметь форму экспоненты с константой затухания  $\tau_b$ . Если  $\tau_a \gg \tau_b$ , «узким горлом» является распад состояния  $|a\rangle$ , и при  $t \gg \tau_b$  флуоресценция затухает со временем  $\tau_a$ .

Чтобы проанализировать случай  $\tau_a \approx \tau_b \approx \tau$ , положим  $\tau_a = \tau_b + \delta\tau$ . Тогда из уравнения (3.234) мы имеем

$$\begin{aligned} \rho_b(t) &\approx \frac{\tau}{\delta\tau} \rho_a(t_0) e^{-(t-t_0)/\tau} \left(1 - e^{-\delta\tau(t-t_0)/\tau^2}\right) \approx \frac{\tau}{\delta\tau} \rho_a(t_0) e^{-(t-t_0)/\tau} \frac{\delta\tau(t-t_0)}{\tau^2} \approx \\ &\approx \frac{(t-t_0)}{\tau} \rho_a(t_0) e^{-(t-t_0)/\tau}, \end{aligned} \quad (3.236)$$

где использовался ряд Тейлора для разложения экспоненты, справедливого при

$$\delta\tau(t-t_0)/\tau^2 \ll 1.$$

Для больших  $t$  сигнал флуоресценции затухает по простому экспоненциальному закону. Таким образом, хотя может показаться, что выражение (3.235) должно обнаруживать сингулярность при  $\tau_a = \tau_b$ , ничего специального в этом пределе не происходит.

**(в)** Временная зависимость сигнала флуоресценции будет точно такой же<sup>1)</sup>, за исключением общей нормировки.

**(г)** Для приведенных данных  $\tau_a = 7,9$  мкс, а  $\tau_b = 2,2$  мкс. Заметим, однако, что соотношение (3.235) симметрично по отношению к перестановке состояний  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ . Следовательно, без дополнительной информации не существует способа узнать, какое из времен жизни короче (в качестве таковой можно использовать, например, измерения флуоресценции на переходе  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ ).

### 3.12. Когерентное лазерное возбуждение

Рассмотрим атомный переход  $J = 0 \rightarrow J' = 1$ , замкнутый в том смысле, что все атомы, возбужденные на верхнее состояние  $J' = 1$ , распадаются обратно на состояние  $J = 0$ . Допустим, что атомы освещаются непрерывным узкополосным резонансным циркулярно поляризованным ( $\sigma_+$ ) светом и что параметр насыщения (задача 3.7) велик:  $\kappa \gg 1$ , например,  $\kappa = 1000$ .

**(а)** Какова усредненная по времени вероятность обнаружения атомов в каждом из четырех подуровней:  $|1, 0\rangle$ ,  $|1, \pm 1\rangle$  и  $|0, 0\rangle$ ?

<sup>1)</sup> Имеется в виду, что кинетика флуоресценции в данной задаче определяется только временами релаксации состояний  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$  и не зависит от маршрутов релаксации. — *Примеч. ред.*

(б) То же, что в п. (а), но теперь предполагаем, что свет является не чисто циркулярно поляризованным, а имеет малую когерентную примесь противоположно поляризованной ( $\sigma_-$ ) циркулярной компоненты. Интенсивность  $\sigma_-$  примеси составляет 1 % от интенсивности  $\sigma_+$  поляризованного света.

(в) То же самое, но теперь предполагаем, что  $\sigma_+$  свет отсекается циркулярным поляризатором, так что атомы видят только  $\sigma_-$  свет той же интенсивности, что и в п. (б).

### Решение

(а) Атомы не возбуждаются на подуровни  $|1, 0\rangle$  и  $|1, -1\rangle$ , поэтому населенность этих подуровней равна нулю. С другой стороны, переход между подуровнями  $|1, 1\rangle$  и  $|0, 0\rangle$  полностью насыщен (задача 3.7), следовательно средняя по времени населенность каждого из подуровней равна приблизительно  $1/2$ , в предположении, что полная населенность равна единице.

(б) Теперь свет возбуждает когерентную суперпозицию подуровней  $|1, \pm 1\rangle$  верхнего состояния в виде

$$\psi_e \approx |1, 1\rangle + a|1, -1\rangle, \quad (3.237)$$

где  $|a|^2 = 0,01$ , а фаза  $a$  определяется относительной фазой двух когерентных циркулярных составляющих света.

Поскольку полная интенсивность света такая же, как в п. (а), переход остается насыщенным, и верхнее состояние (3.237) имеет среднюю населенность  $\approx 1/2$ . При этом населенности подуровней  $|1, 1\rangle$  и  $|1, -1\rangle$  равны соответственно  $\approx 1/2$  и  $\approx 0,01 \times 1/2$ .

(в) Теперь свет возбуждает подуровень  $|1, -1\rangle$  верхнего состояния. Поскольку 1 % интенсивности  $\sigma_+$  составляющей еще соответствует большому значению параметра насыщения  $\kappa = 0,01 \cdot 1000 = 10$ , средняя по времени населенность подуровня  $|1, -1\rangle \sim 1/2$ .

Такое же увеличение населенности этого подуровня как и в п. (б), может быть достигнуто, если вместо отсекающей  $\sigma_+$  компоненты к системе прикладывается магнитное поле, которое расщепляет подуровни  $J' = 1$ , и частота света оказывается резонансной только по отношению к переходу  $|1, 0\rangle \rightarrow |1, -1\rangle$ .

Сравнение случаев (б) и (в) показывает, что скорость светоиндуцированных переходов (в данном случае  $|0, 0\rangle \rightarrow |1, -1\rangle$ ) в сильной степени зависит от присутствия резонансного светового поля, приложенного к соседнему переходу (в данном случае  $|0, 0\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$ ). Этот эффект принадлежит к широкому классу явлений (включающему *электромагнитно индуцированную прозрачность*, см. [Kocharovskaya (1992), Nagris (1997)]), основанных на когерентном взаимодействии многокомпонентного света с несколькими состояниями квантовой системы (атомов, молекул, твердых тел, ядер).

### 3.13. Пролетное уширение

Пучок атомов, движущихся со скоростью  $\vec{v} = v\hat{x}$ , пересекает лазерный пучок, распространяющийся в направлении  $\hat{y}$ . Непрерывный узкополосный лазерный пучок имеет частоту  $\omega_L$ , его размер по оси  $z$  больше, чем размеры атомного пучка, а его интенсивность  $I(x, z) = I_0$  при  $-w < x < w$  и нулю в остальных местах. Мы предполагаем, что интенсивность лазерного пучка является достаточно низкой, так



что эффектами насыщения можно пренебречь. Предположим также, что плотность атомов в пучке достаточно низкая и поэтому атомный пучок может рассматриваться как оптически тонкая среда.

**(а)** Определить уширение линии поглощения, связанное с конечностью времени взаимодействия между атомами и светом (пролетное уширение).

**(б)** Пусть лазер настроен на частоту перехода между основным и возбужденным состояниями атома (разнесенными по энергии на величину  $\hbar\omega_0$ ) с излучательным временем жизни  $\tau$ . Для  $v = 5 \cdot 10^4$  см/с и диаметра  $2w = 1$  мм найти, при каких значениях  $\tau$  эффект пролетного уширения будет обеспечивать доминирующий вклад в ширину линии.

**(в)** Используя классическую и (или) квантово-механическую картину, объяснить дополнительные максимумы на спектральном контуре пролетноуширенной линии (см. рис. 3.20). Использовать предположение, что время жизни возбужденного состояния  $\tau$  существенно превосходит пролетное время  $\sim 2w/v$ .

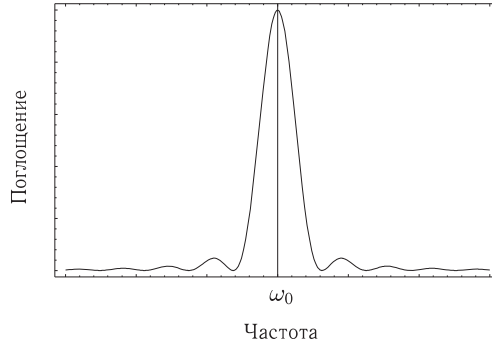


Рис. 3.20. Спектр поглощения для атомного перехода, для которого форма линии обусловлена пролетным уширением

**(г)** Каков спектр пролетно-уширенной линии для гауссова сечения лазерного пучка  $I(x, z) = I_0 e^{-2x^2/w^2}$  (множитель 2 появляется в показателе степени, поскольку радиус пучка, по общему соглашению, определяется по уровню спада интенсивности в  $1/e$  раз).

### Решение

**(а)** Атом, пересекающий лазерный пучок, «видит» импульс излучения с длительностью  $2w/v$ . Это означает, что эффективный спектр излучения уширен в соответствии с условием неопределенности

$$\Delta\nu\Delta t \sim \frac{1}{2\pi}. \quad (3.238)$$

Следовательно,

$$\Delta\nu_{\text{transit}} \sim \frac{v}{4\pi w}. \quad (3.239)$$

(б) Для  $v = 5 \cdot 10^4$  см/с и  $2w = 1$  мм получаем

$$\Delta\nu_{\text{transit}} \sim 0,1 \text{ МГц.} \quad (3.240)$$

Радиационная ширина равна

$$\Delta\nu_{\text{radiative}} = \frac{1}{2\pi\tau}. \quad (3.241)$$

Следовательно, пролетное уширение доминирует, когда

$$\boxed{\tau \gg 2 \text{ мкс.}} \quad (3.242)$$

(в) Пусть фаза лазерного света такова, что его электрическое поле на атоме равно  $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t)$ . Спектр интенсивности этого излучения можно выразить через Фурье компоненты <sup>1)</sup>:

$$\mathcal{E}(\omega) = \int_{t=-w/v}^{t=w/v} \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t') e^{-i\omega t'} dt', \quad (3.243)$$

и вычисляя величину  $I(\omega) \propto \mathcal{E}(\omega)\mathcal{E}(\omega)^*$ , после некоторых преобразований находим, что

$$\boxed{I(\omega) \propto \frac{\sin^2[(\omega - \omega_L)w/v]}{(\omega - \omega_L)^2}.} \quad (3.244)$$

Эта функция центрирована на частоте лазерного излучения  $\omega_L$ . Если сканировать частоту лазерного пучка через атомный резонанс, то спектр поглощения (являющийся результатом спектрального распределения интенсивности (3.144)) будет иметь вид, показанный на рис. 3.20 (в пределе  $\tau \gg w/v$ ).

Дополнительные максимумы на спектральном контуре аналогичны таким же максимумам, которые появляются при дифракции света на узкой щели. В случае узкой щели свойства монохроматического поля модифицируются путем ограничения протяженности поля в пространстве, тогда как при пролетном уширении свойства поля модифицируются путем ограничения протяженности поля во времени.

(г) В этом случае зависящее от времени электрическое поле, которое видят атомы, пролетающие через лазерный пучок, дается выражением

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t) e^{-v^2 t^2 / w^2}, \quad (3.245)$$

<sup>1)</sup> Фурье-образ или *спектральное распределение* произвольной зависящей от времени функции  $F(t)$  определяется как

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt.$$

Обратное преобразование имеет вид

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega.$$

где мы преобразовали пространственную зависимость интенсивности лазерного пучка во временную зависимость электрического поля, приравнивая  $\mathcal{E}(t)$  корню квадратному из  $I(x = vt, z)$ . Как и в п. (в), мы обращаемся к Фурье-образу от  $\mathcal{E}(t)$ :

$$\mathcal{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t') e^{-v^2 t'^2 / w^2} e^{-i\omega t'} dt', \quad (3.246)$$

и для  $I(\omega) \propto \mathcal{E}(\omega)\mathcal{E}(\omega)^*$  мы получаем

$$I(\omega) \propto e^{-w^2(\omega - \omega_L)^2 / (2v^2)}, \quad (3.247)$$

где мы пренебрегли сильно нерезонансными членами, включающими множители при  $\exp[-w^2(\omega + \omega_L)^2 / (2v^2)]$ . Таким образом, спектральный контур в этом случае описывается гауссианом. Отметим, что интенсивность падает до уровня  $1/e$  при  $|\omega - \omega_L| = \sqrt{2}(v/w)$ , тогда как первые нули контура, показанные на рис. 3.20, возникают при  $|\omega - \omega_L| = \pi v/w$ .

### 3.14. Парадоксы флуоресценции и рассеяния света

Здесь мы рассматриваем ряд концептуальных вопросов, нацеленных на выяснение понимания некоторых ключевых проблем спонтанного излучения и рассеяния и призванных помочь развитию интуиции в этих вопросах. Чтобы избежать возможной путаницы, мы стараемся максимально ясно описать физическую ситуацию, к которой относится каждый вопрос, хотя проблема, затрагиваемая этим вопросом, может иметь более широкий смысл. Апробирование этих вопросов на наших коллегам (и на нас самих) убедило нас, что некоторые из этих вопросов не столь тривиальны, как это может показаться на первый взгляд.

**(а)** Свободный покоящийся двухуровневый атом, находящийся в основном состоянии, облучается импульсом нерезонансного излучения гауссовой формы. Свет является почти монохроматическим со спектральной шириной, ограниченной конечной длительностью импульса. Отстройка частоты света от резонанса значительно превышает как излучательную ширину верхнего состояния, так и обратную длительность светового импульса. Возбуждающее излучение может считаться предельно слабым. Фотодетектор регистрирует фотоны, рассеянные в направлении, не совпадающем с направлением распространения возбуждающего света.

Допустим, что, используя описанную установку, мы обнаружили, что вероятность регистрации рассеянного фотона равна  $P$ . Как изменится эта вероятность, если вместо одного атома мы имеем два? Принять, что первоначально атомы располагаются в пространственной области с линейными размерами, много меньшими, чем приведенная длина волны света  $\lambda/2\pi$ . Принять, что для длительности возбуждающего импульса  $\tau$  справедливо неравенство

$$\tau \ll \frac{Mc\Delta x}{\hbar\omega}, \quad (3.248)$$

где  $M$  — масса атома,  $\Delta x$  — первоначальная неопределенность его координаты, и что атомы не взаимодействуют друг с другом в отсутствие света. Что произойдет, если число атомов увеличится до  $N$ ?

**(б)** Пусть  $N \gg 1$  атомов приготовлены так, как описано выше, за исключением того, что все они находятся в возбужденном, а не в основном состоянии. На атомы не действует никакой световой импульс. Как время излучательного распада зависит от  $N$ ?

**(в)**  $N$  атомов приготовлены, как описано выше, в основном состоянии; к системе добавляется один атом, находящийся в возбужденном состоянии. На атомы не действует никакой импульс возбуждения. Как присутствие  $N$  атомов в основном состоянии влияет на распад возбужденного атома?

**(г)**  $N$  атомов приготовлены как описано выше в основном состоянии. Один резонансный фотон падает на систему и поглощается, создавая одно возбуждение в ансамбле  $N$  атомов. Как время излучательного затухания для этого возбуждения зависит от  $N$ ?

**(д)** То же что и в п. (а), но теперь атомы являются трехуровневыми системами и детектор снабжен цветным фильтром, так что детектор чувствует только излучение, обусловленное комбинационным рассеянием на третий уровень.

**(е)** В предыдущих пунктах мы предполагали, что  $N$  атомов приготовлены при нулевой температуре, так что их первоначальное движение связано только с их пространственной локализацией. Как изменятся эти результаты для атомов, находящихся при конечной температуре? Импульс возбуждения предполагается значительно более коротким, чем обратная доплеровская ширина перехода.

**(ж)** В предыдущих пунктах мы предполагали, что  $N$  атомов являются свободными. Что произойдет, если они будут локализованы в потенциальном поле ловушки? Предполагается, что энергии внутренних возбуждений (верхнего и третьего уровня) значительно выше энергии, связанной с локализирующим потенциалом.

**(з)** Слабый резонансный монохроматический свет рассеивается одиночным двухуровневым атомом в направлении, отличном от направления вперед (в данном случае процессы рассеяния и резонансной флуоресценции неразличимы). Когерентно ли рассеянное излучение с падающим? Иными словами, можно ли наблюдать стационарную картину интерференции при наложении рассеянного света и части возбуждающего света, например, на отдельном экране? Эффектами отдачи можно пренебречь.

### Решение

**(а)** Вероятность регистрации рассеянного фотона в 4 раза выше в случае двух атомов (или, в общем случае,  $\propto N^2$ ). При условиях, сформулированных в данной задаче, в принципе невозможно определить, какой из двух атомов рассеял фотон, и амплитуды рассеяния на двух атомах интерferируют конструктивно. Условие (3.248) формулируется таким образом, что доплеровское уширение, возникающее в результате атомного движения (ср. с задачей 8.1), которое, в свою очередь, обязано первоначальной локализации атомов, много меньше спектральной ширины возбуждающего света. Отметим также, что начальная локализация атомов в объеме с линейными размерами, меньшими длины световой волны, приводит к тому, что первоначальная неопределенность импульса ( $\sim \hbar/\Delta x$ ) превосходит импульс отдачи, связанный с рассеянием фотона ( $\sim \hbar\omega/c$ ), и, таким образом, по величине импульса атома после акта рассеяния невозможно определить, какой из атомов рассеял фотон.

**(б)** Вопросы (а) и (б) были первоначально сформулированы и разрешены в работе [Dicke (1954)], которая в настоящее время служит основой целого направления современной оптики и спектроскопии, см., например, [Andreev и др. (1993)].

Ответ на вопрос (б) состоит в том, что время излучательного распада возбужденного состояния равно  $\sim \tau_0/N$ , где  $\tau_0$  — радиационное время жизни изолированного атома. Это — эффект *кооперативного излучения*, известный под названием *сверхизлучения Дике*. Его происхождение можно качественно понять следующим образом. Сначала, после того как атомы были приготовлены в возбужденном состоянии, они «не знали» о существовании друг друга, и их спонтанное испускание происходило независимо друг от друга. Поскольку в системе имеется  $N$  атомов, первый фотон флуоресценции появляется спустя характерное время  $\tau_0/N$ . Поскольку фотон образуется в том месте, где расположены все атомы, и сечение взаимодействия атома с фотоном равно  $\lambda^2/2\pi$  (см., задачу 3.5), первый фотон взаимодействует с системой атомов, вызывая фазирование отдельных атомных диполей<sup>1)</sup>, таким образом индуцируя «лаvinу», которая почти мгновенно опустошает верхнее состояние.

Заметим, что поскольку число испускаемых фотонов флуоресценции равно  $N$  и время излучения  $\sim \tau_0/N$ , интенсивность излучения превышает в  $\sim N^2$  раз интенсивность излучения от одиночного атома<sup>2)</sup>. Поскольку этот импульс короткий, возникает неизбежная неопределенность энергии соответствующих фотонов, и не возникает никаких проблем с полным балансом энергии.) Расчеты (см. [Andreev и др. (1993), Sargent и др. (1977)] и [Allen и Eberly (1987)]) показывают, что при  $N \gg 1$  пиковая интенсивность в  $N^2/4$  раз выше, чем интенсивность для одиночного атома.

**(в)** Присутствие атомов в основном состоянии существенным образом влияет на затухание: тогда как первоначальная вероятность перехода такая же, как и для свободного возбужденного атома, полная вероятность испускания фотона равна  $1/N$ . Это означает, что излучение оказывается, в значительной степени, «пленным» в среде при  $N \gg 1$ . Как может быть, что один атом в системе возбужден (мы не знаем, какой именно, поскольку атомы обмениваются возбуждениями через электромагнитное поле), но система не способна излучать? На самом деле — это чисто классический эффект. Допустим, что мы имеем два идентичных классических диполя, локализованных в одном месте, которые могут терять свою энергию только через излучение. Существуют две моды колебаний системы: симметричная мода, когда два диполя колеблются в фазе, и антисимметричная мода, когда они колеблются с фазовым сдвигом  $\pi$ . Ясно, что энергия излучается симметричной модой, и никакого излучения не происходит из несимметричной моды. Если система приготовлена таким образом, что первоначально только один диполь возбужден (т.е. в суперпозиции

<sup>1)</sup> Детальное теоретическое рассмотрение [Andreev и др. (1993)] различает взаимодействие между атомами через поле излучения, которое определяют коллективное излучение и вынужденное излучение.

<sup>2)</sup> Здесь мы полагаем, что спектральная ширина испускаемого излучения  $\sim N/\tau_0$  значительно меньше, чем частота перехода. Кроме того, поскольку сокращение длительности импульса при коллективном излучении ведет к спектральному уширению импульса, может возникнуть вопрос, как при этом сохраняется баланс энергии. Объяснение содержится в том факте, что начальное состояние должно быть приготовлено за время, много короче времени испускания, например, с помощью короткого импульса излучения, переводящего каждый атом из основного состояния в возбужденное (такой инвертирующий импульс называется  $\pi$ -импульсом).

симметричной и антисимметричной моды), половина энергии излучается, а половина энергии сохраняется в антисимметричном коллективном движении двух диполей. Для случая  $N$  осцилляторов решение классической задачи (см., например, [Andreev и др. (1993)]) показывает, что  $N - 1$  мод из полного числа мод  $N$  не излучают.

Квантово-механическое рассмотрение, развитое Дике (1954), использует понятие коллективного псевдоспина для ансамбля  $N$  двухуровневых атомов. Аналогия с реальным спином становится очевидной, если вместо свободных трехуровневых атомов представить себе частицы со спином  $1/2$ , помещенные во внешнее магнитное поле, [Allen и Eberly (1987)]. Состоянию  $N$  атомов, находящихся в основном состоянии, соответствует симметричная волновая функция с проекцией псевдоспина  $-N/2$ , тогда как состоянию  $N$  атомов, находящихся в возбужденном состоянии, соответствует симметричная волновая функция с проекцией псевдоспина  $N/2$ . Ясно, что обе волновые функции соответствуют полному псевдоспину системы  $N/2$ . Легко показать, что дипольные переходы возможны только между состояниями с одним и тем же псевдоспином. Непосредственное следствие этого состоит в том, что из полного числа  $N$  возможных состояний с одним возбужденным атомом только одно (полностью симметричное) состояние может распадаться в основное состояние, лишенное атомных возбуждений. Этот результат аналогичен обсужденному выше классическому результату.

Мы объяснили, почему полная вероятность испускания фотона равна  $1/N$ . В п. (г) мы покажем, что единственное состояние с одним возбуждением, которое способно излучать (симметричное состояние), имеет дипольный момент, связывающий его с основным состоянием. И этот момент в  $N^{1/2}$  раз больше соответствующего момента для одиночного атома. Таким образом, симметричное состояние с одним возбуждением излучает с интенсивностью в  $N$  раз более высокой, чем в случае одиночного возбужденного атома. Поскольку исходный вес этого состояния равен  $1/N$ , полная начальная интенсивность точно такая же, как и для изолированного одиночного атома. С другой стороны, поскольку полная испущенная энергия в  $N$  раз меньше, это означает, что характерное время испускания равно  $\tau_0/N$ .

**(г)** Каждый из атомов в нашей системе при поглощении фотона оказывает-ся в когерентной суперпозиции основного и возбужденного состояний. Амплитуда возбужденного состояния в этой суперпозиции равна  $1/N^{1/2}$ , так что, суммируя вероятности обнаружения атомов в возбужденном состоянии по всем атомам, мы получаем единицу.

Когерентная суперпозиция верхнего и нижнего атомных состояний соответствует дипольному моменту (в данном случае с амплитудами  $1/N^{1/2}$  от их максимальной величины), осциллирующему на частоте перехода. Мы имеем  $N$  таких диполей, которые осциллируют когерентно. Складывая все амплитуды и возводя результат в квадрат, мы получаем  $(N \cdot 1/\sqrt{N})^2 = N$ . Таким образом интенсивность испускания увеличивается в  $N$  раз по сравнению со случаем изолированного атома, и время излучательного распада сокращается в  $N$  раз.

**(д)** В этом случае вероятность рассеяния меняется линейно с числом атомов. Поскольку процесс рассеяния оставляет атом в состоянии, отличном от его начального состояния, теперь можно точно сказать, какой из атомов рассеял свет. Для этого после события рассеяния потребуются провести дополнительные измерения. Таким образом, амплитуды рассеяния на различных атомах не интерферируют.

(е) Ни один из полученных выше результатов не меняется для атомов при повышении температуры ( $T > 0$ ) в предположении, что импульс возбуждения много короче обратной доплеровской ширины перехода. Отметим, что в последние годы квантовые вырожденные атомные пары и, в частности, бозе-эйнштейновский конденсат, превращаются в экспериментальную базу для исследований процессов коллективного испускания и рассеяния, см. обзор [Ketterle и Inouye (2001)].

(ж) Атомы занимают энергетические уровни потенциала размерного квантования и не обязательно находятся на одном и том же уровне<sup>1)</sup>. Соображения доплеровского уширения не применимы к случаю достаточно сильного потенциала, но предыдущие результаты остаются справедливыми, если атом, рассеивающий фотон, с максимальной вероятностью остается на том же уровне энергии потенциала после рассеяния (так что мы не можем с определенностью сказать, какой атом рассеял фотон, исключая случай п. (в)). Условием этого является малость энергии отдачи для изолированного атома по сравнению с интервалом между соседними уровнями энергии локализирующего потенциала. Здесь имеется прямая аналогия с эффектом Мёссбауэра — отсутствие отдачи при излучении (поглощении) гамма-кванта ядрами, когда и излучатель, и поглотитель являются частями кристаллической решетки (см., например, [Wertheim (1964)]).

(з) Рассеянный свет действительно когерентен возбуждающему свету, т.е., их относительные фазы не являются случайными. Это можно видеть из того факта, что рассеянное излучение создается атомными диполями (соответствующими суперпозициям основного и возбужденного состояний), чьи относительные частоты и фазы определяются возбуждающим полем. В этом состоит отличие от случая спонтанного излучения для атома, первоначально приведенного в возбужденное состояние, для которого фаза испущенного света является случайной. Детальное обсуждение когерентных свойств рассеянного света и резонансной флуоресценции приведено в части 8 книги [Loudon (2000)].

### 3.15. Вероятность двухфотонного перехода

Рассмотрим схему энергетических уровней, показанную на рис. 3.21. Оценим вероятность двухфотонного перехода при возбуждении атома из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$  под действием двух световых полей с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ . Пусть переходы  $|i\rangle \rightarrow |k\rangle$  и  $|k\rangle \rightarrow |f\rangle$  являются разрешенными электрическими дипольными переходами ( $E1$ ) с моментами  $d_{ik}$  и  $d_{kf}$  соответственно. Будем пренебрегать доплеровским уширением и считать, что выполняются условия двухфотонного резонанса:

$$\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = E_f - E_i. \quad (3.249)$$

Вообще говоря, двухфотонные переходы возникают во втором порядке теории возмущений, когда возмущением служит электрическое поле световой волны. Амплитуда двухфотонного перехода содержит два члена, которые различаются порядком

<sup>1)</sup> Максимальные значения чисел заполнения зависят от того, являются ли атомы бозонами или фермионами.

поглощения фотонов  $\omega_1$  и  $\omega_2$  (рис. 3.21, а и б). Для простоты рассмотрим случай, когда

$$|\hbar\omega_1 - (E_k - E_i)| \ll |\hbar\omega_2 - (E_k - E_i)|, \quad (3.250)$$

так что член с фотоном  $\omega_1$ , поглощенным первым (рис. 3.21, а), является доминирующим по сравнению с членом, когда первым поглощается фотон  $\omega_2$  (рис. 3.21, б). Мы также предполагаем, что для однофотонной расстройки  $\Delta \equiv \hbar\omega_1 - (E_k - E_i) = E_f - E_k - \hbar\omega_2$  справедливо неравенство  $|\Delta| \gg \Gamma_k$ , где  $\Gamma_k$  — естественная ширина промежуточного уровня.

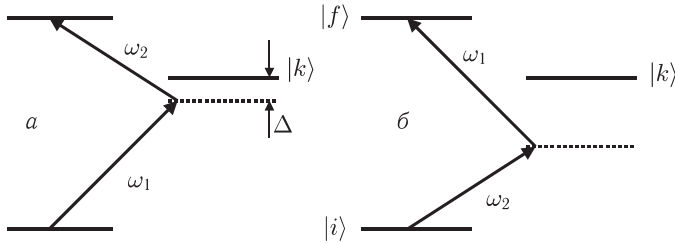


Рис. 3.21. Уровни энергии, принимающие участия в двухфотонном переходе. Случаи а и б отличаются порядком поглощения фотонов с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$

### Решение

Если присутствует только первое световое поле, атомы испытывают осцилляции Раби на частоте

$$\Omega_1 = \sqrt{\Delta^2 + \frac{d_{ik}^2 \mathcal{E}_1^2}{\hbar^2}}, \quad (3.251)$$

и максимальная амплитуда вероятности обнаружения атомов в состоянии  $|k\rangle$  равна  $d_{ik}\mathcal{E}_1/(\hbar\Omega_1)$  (см. задачу 3.1). Здесь  $\mathcal{E}_1$  — амплитуда электрического поля световой волны  $\omega_1$ . Следовательно, усредненная по времени вероятность  $\langle P \rangle$  обнаружения атома в состоянии  $|k\rangle$  равна

$$\langle P_k \rangle = \frac{1}{2} \frac{d_{ik}^2 \mathcal{E}_1^2}{\hbar^2 \Omega_1^2}. \quad (3.252)$$

Поскольку теперь существует ненулевая амплитуда вероятности обнаружения атома в состоянии  $|k\rangle$ , то появляется конечная вероятность поглощения атомом фотона  $\omega_2$  с переходом в состояние  $|f\rangle$ .

Интересно забыть на минуту условие двухфотонного резонанса (3.249) и рассмотреть спектр поглощения системы по отношению к настройке частоты  $\omega_2$ . Из закона сохранения энергии ясно, что поглощение возможно только тогда, когда выполняется условие (3.249) (с точностью до ширины линии перехода); в противном случае поглощение отсутствует (даже если  $\hbar\omega_2 = E_f - E_k$ ), поскольку возникает дисбаланс между энергией двух поглощенных фотонов и энергией возбужденного атома. Часто говорят, что поле  $\omega_1$  возбуждает *виртуальное состояние* (штриховые линии на рис. 3.21), отличающееся от состояния  $|k\rangle$  только энергией, которая равна  $E_i + \hbar\omega_1$ .

Согласно этой картине, следующую стадию процесса возбуждения можно рассматривать как однофотонный переход из резонансного виртуального состояния



в состояние  $|f\rangle$ . Предполагая, что частота Раби для этой второй стадии много меньше естественной ширины конечного состояния  $\Gamma_f$ , так что реализуется переуспокоенный режим (см. задачу 3.1), скорость перехода (число актов двухфотонного поглощения в единицу времени) может быть представлена в виде

$$W_{2\gamma} \approx \langle P_k \rangle \frac{d_{kf}^2 \mathcal{E}_2^2}{\hbar^2 \Gamma_f} \approx \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar^4 \Gamma_f} \left[ \frac{(d_{ik} \mathcal{E}_1 d_{kf} \mathcal{E}_2)^2}{\Delta^2 + (d_{ik} \mathcal{E}_1 / \hbar)^2} \right]. \quad (3.253)$$

(множитель  $1/2$  возникает в результате усреднения по времени населенности промежуточного состояния (формула (3.252)).

Это выражение показывает, что когда оба световых поля являются слабыми, скорость двухфотонного перехода меняется как произведение их интенсивностей. При высокой интенсивности света  $\omega_1$ , такой что  $(d_{ik} \mathcal{E}_1)^2 \gg \Delta^2$ , скорость перехода перестает зависеть от интенсивности этого поля (эффект насыщения). Хотя формула (3.252) не обнаруживает насыщения для сильного поля  $\omega_2$ , этот результат является следствием нашего неявного предположения, сделанного при выводе формулы: мы считали поле  $\omega_2$  достаточно слабым, чтобы оно не влияло на эволюцию двухуровневой системы, образованной состояниями  $|i\rangle$  и  $|k\rangle$  в присутствии поля  $\omega_1$ . Корректный расчет, не использующий такого предположения [Тер-Микаэлян (1997)] показывает, что на самом деле скорость двухфотонного перехода как функция интенсивности поля  $\omega_2$  (при заданной величине слабого поля  $\omega_1$ ) также испытывает насыщение при  $(d_{kf} \mathcal{E}_2)^2 \gg \Delta^2$ . Интересно отметить, что, когда одно из полей,  $\omega_1$  или  $\omega_2$ , является слабым, скорость двухфотонного перехода не может превышать скорость резонансного однофотонного перехода в слабом поле, независимо от интенсивности второго поля.

Различные другие аспекты двухфотонных переходов рассматриваются, в частности, в работе [Krainov и др. (1997)].

### 3.16. Зануление рамановского рассеяния

*Комбинационное (рамановское) рассеяние* — это процесс, при котором фотон из падающего светового пучка поглощается, и испускается фотон другой частоты. Атомы или молекулы рамановской среды в процессе рассеяния переводятся в состояния, отличные от начальных. Рассмотрим процесс рамановского рассеяния для модельной структуры энергетических состояний, показанной на диаграмме поглощения–испускания рис. 3.22. Пользуясь фейнмановской диаграммной техникой (Приложение Н), записать амплитуду процесса. Показать, что эта амплитуда обращается в ноль, когда энергия состояния  $2P$  располагается точно посередине между энергиями состояний  $2S$  и  $1S$ . Амплитуда электрического дипольного перехода между состояниями  $1S$  и  $2S$  равна нулю.

#### Решение

Две возможные Фейнмановские диаграммы (см. Приложение Н) для этого процесса показаны на рис. 3.23. Полная амплитуда процесса, как мы видим, дается выражением

$$V_{1S \rightarrow 2S} \propto \frac{d_{21} d_{22}}{E_{2P} - \hbar \omega_1} + \frac{d_{21} d_{22}}{(E_{2P} + \hbar \omega_1 + \hbar \omega_2) - \hbar \omega_1}, \quad (3.254)$$

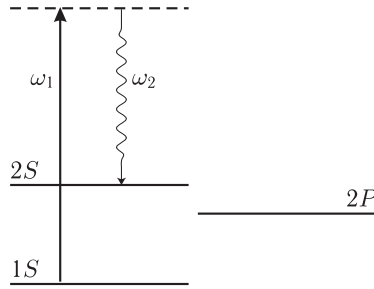


Рис. 3.22. Рамановское рассеяние в модельной системе

где мы приняли  $E_{1S} = 0$ , а  $d_{mn}$  означает соответствующую амплитуду диполя. Закон сохранения энергии требует, чтобы выполнялось равенство  $\hbar(\omega_1 - \omega_2) = E_{2S}$ . Тогда из соотношения (3.254) сразу видно, что амплитуда рассеяния обращается в ноль, когда  $E_{2S} = 2E_{2P}$ .

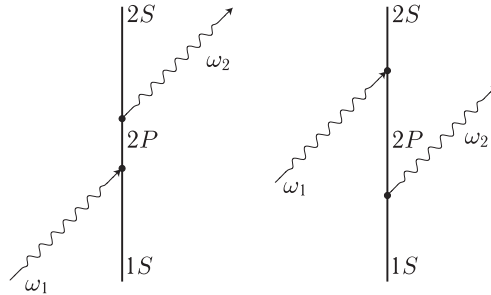


Рис. 3.23. Фейнмановские диаграммы, описывающие процесс, показанный на рис. 3.22

Заметим, что если  $\omega_1$  значительно превышает энергетическое расстояние между уровнями  $1S$ ,  $2S$  и  $2P$ , все расстояния между уровнями становятся эффективно равными нулю. В результате рамановское рассеяние в пределе высоких частот также пропадает.

### 3.17. Возбуждение атомов нерезонансными лазерными импульсами

Рассмотрим двухуровневые атомы (первоначально находящиеся в состоянии  $|1\rangle$ ), взаимодействующие с нерезонансным лазерным импульсом (рис. 3.24). Пусть временной контур импульса представляет собой гауссиан с полной шириной на полувысоте (ПШПВ) равной  $\tau$ . Предположим далее, что свет, будучи близким к резонансу, одновременно хорошо отстроен от резонанса, так что  $\Delta \gg 1/\tau$ , где  $\Delta$  — величина отстройки. Предположим также, что  $\tau \ll 1/\Gamma$ , где  $\Gamma$  — полная радиационная ширина верхнего состояния.

(а) В предположении о низкой интенсивности света найти вероятность обнаружения атомов в состоянии  $|2\rangle$  после того как действие импульса практически завершилось, но состояние  $|2\rangle$  не успело высветиться спонтанным образом. Рассмотр-

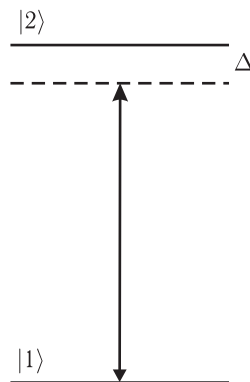


Рис. 3.24. Возбуждение атомов нерезонансным лазерным импульсом

реть зависимость этой вероятности от  $\Delta$ . Парциальная ширина перехода  $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$  равна  $\Gamma_p$ .

**(б)** Рассмотреть полевое уширение (см. задачу 3.7) контура спектра возбуждения. (Другими словами, как ширина спектра возбуждения зависит от мощности светового пучка при высоких уровнях возбуждения?).

**З а м е ч а н и е.** Эта задача основана на результатах статьи [Макаров (1983)]; см. также [Letokhov (1987)], гл. 2.

### Решение

**(а)** Хотя атомы могут осуществлять циклы поглощения–испускания пока действует световой импульс, они должны всегда возвращаться в начальное состояние после того как импульс завершен, если рассматриваем только одно- и двухфотонные процессы. Двухфотонный процесс должен возвращать систему в ее первоначальное состояние в таком двухуровневом приближении <sup>1)</sup>, тогда как процесс, при котором фотон поглощается, а атом остается в верхнем состоянии после завершения действия импульса, запрещен законом сохранения энергии. Это — пример *адиабатической эволюции*, когда система следует за квантовым состоянием, совершающим эволюцию под действием зависящего от времени возмущения, и, следовательно, возвращается в свое первоначальное состояние после прекращения действия возмущения.

Ненулевая вероятность возбуждения возникает в следующем порядке теории возмущений, т.е. мы должны рассматривать трехфотонный процесс: два фотона лазерного излучения поглощаются, а один фотон спонтанно излучается. Поскольку энергия спонтанно излучаемого фотона не обязана совпадать с частотой лазерного излучения, трехфотонному процессу может быть обеспечена точная резонансность (или, точнее, резонансность с точностью до  $\Gamma$ ), что позволяет удовлетворить закону сохранения энергии или, другими словами, снять требование адиабатичности процесса.

На рис. 3.25 показаны возможные фейнмановские диаграммы (см. Приложение Н) для трехфотонного процесса, когда два лазерных фотона ( $\omega_l$ ) поглощаются, а один

<sup>1)</sup> Мы также пренебрегаем процессами, при которых, например, испускается  $N$  фотонов.

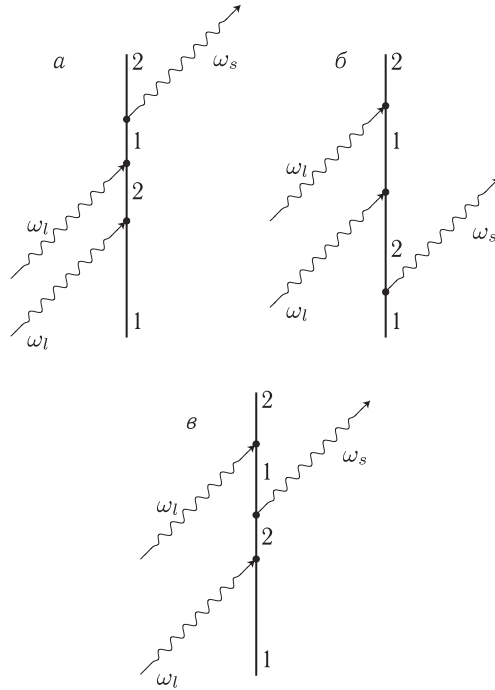


Рис. 3.25. Фейнмановские диаграммы, соответствующие трехфотонным процессам, когда два лазерных фотона поглощаются, а один фотон спонтанно излучается. Диаграмма *в* резонансно усилена по сравнению с диаграммами *а* и *б*

фотон ( $\omega_s$ ) спонтанно испускается. Наиболее важной из этих диаграмм является диаграмма *в* по причине резонансного усиления соответствующих амплитуд:

$$V_{21} \approx V_{21}(C) \sim \frac{d^3 \mathcal{E}_l^2 \mathcal{E}_s}{\hbar^2 \Delta^2}. \quad (3.255)$$

Выражение (3.255) показывает, что вероятность обнаружения атомов в состоянии  $|2\rangle$  меняется как  $\Delta^{-4}$  с отстройкой частоты. Этот результат можно противопоставить хорошо знакомому случаю однофотонного монохроматического возбуждения перехода с лоренцевыми крыльями, что приводит к уменьшению вероятности возбуждения по закону  $\Delta^{-2}$ .

Вероятность обнаружения атома в состоянии  $|2\rangle$  после завершения лазерного импульса может быть получена из амплитуды (3.255), как показано в Приложении Н. Мы же сделаем оценку этой вероятности, исходя из следующих качественных аргументов.

Мы можем рассматривать переход в верхнее состояние  $|2\rangle$  как трехступенчатый процесс. Сначала атом находится в состоянии  $|1\rangle$ , лазерный импульс плавно «включается», и атом теперь имеет вероятность  $d^2 \mathcal{E}_l^2 / (\Delta^2)$  перехода в верхнее состояние (см. задачу 3.1). Однако если за время действия импульса не происходит спонтанного излучения, атом адиабатически вернется в состояние  $|1\rangle$  пока импульс плавно выключается.

Таким образом, нам требуется второй этап: спонтанное излучение из состояния  $|2\rangle$  в состояние  $|1\rangle$  в течение импульса, чтобы нарушить условие адиабатичности. Вероятность  $P_{\text{spont}}$  для такого акта спонтанного испускания описывается произведением населенности состояния  $|2\rangle$  во время действия импульса, скорости спонтанного распада  $\Gamma_p$  и длительности импульса:

$$P_{\text{spont}} \approx \frac{d^2 \mathcal{E}_l^2}{2\Delta^2} \Gamma_p \tau. \quad (3.256)$$

Если такое событие происходит, то атом в этот момент переводится в состояние  $|1\rangle$ , при том, что световое поле еще действует.

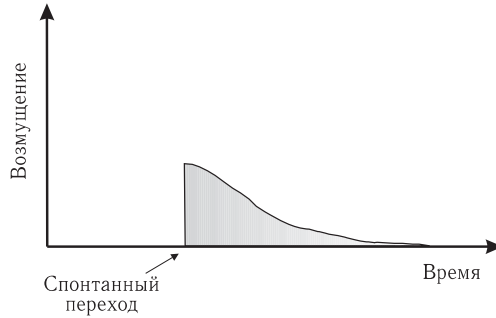


Рис. 3.26. Схематическое изображение временной зависимости возмущения, которое испытывает атом, осуществляющий резкий спонтанный переход обратно в основное состояние  $|1\rangle$  во время действия лазерного импульса. Внезапное изменение возмущения нарушает условие адиабатичности, позволяя тем самым продолжить переход

И, наконец, третья стадия — это возбуждение обратно в состояние  $|2\rangle$ , но таким образом, что атом остается в состоянии  $|2\rangle$  после того как импульс плавно выключен. Важный момент этой стадии процесса состоит в том, что возмущение, пытающееся возбудить атом в состояние  $|2\rangle$ , имеет временную зависимость, схематически изображенную на рис. 3.26. Поскольку возмущение включается «внезапно», вероятность завершить процесс в возбужденном состоянии дается выражением  $\sim d^2 \mathcal{E}_l^2 / (2\Delta^2)$ . Это можно понять следующим образом: внезапно включаемое возмущение эквивалентно внезапно выключаемому импульсу (для которого ответ представляется более очевидным).

Комбинируя все упомянутые множители, мы получаем выражение для искомой вероятности

$$P(1 \rightarrow 2) \sim \frac{d^4 \mathcal{E}_l^4}{2\hbar^4 \Delta^4} \Gamma_p \tau. \quad (3.257)$$

**(б)** Полевое уширение происходит, когда величина  $d\mathcal{E}_l$  становится сопоставимой с  $\hbar\Delta$  и, таким образом, последняя величина перестает определять максимальный энергетический масштаб задачи. Таким образом, при заданной величине  $d\mathcal{E}_l$  отстройка  $\Delta^*$ , за пределами которой вероятность обнаружения атомов в состоянии  $|2\rangle$  описывается формулой (3.257), дается выражением  $\Delta^* \sim d\mathcal{E}_l / \hbar$ , т.е. спектральная ширина резонанса меняется как квадратный корень из интенсивности импульса — обычная зависимость полевого уширения резонансов, см. задачу 3.7, формула (3.173).

### 3.18. Магнитные дипольные (M1) переходы, индуцированные сверхтонким взаимодействием

Рассмотрим однофотонные переходы между состояниями  $nS_{1/2}$  и  $n'S_{1/2}$  одной четности ( $n$  и  $n'$  — главные квантовые числа,  $n \neq n'$ ) в атоме с одним  $s$ -электроном поверх замкнутых оболочек, например переход  $6S_{1/2} \rightarrow 7S_{1/2}$  из основного состояния атома Cs. Правило отбора по четности запрещает такой переход как электрический дипольный (E1); магнитная (M1) амплитуда перехода также оказывается сильно подавленной. Гамильтониан магнитного диполя дается выражением (см., например, задачу 1.4):

$$H_{M1} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \mu_0(\vec{l} + 2\vec{s})\vec{B}, \quad (3.258)$$

где  $\vec{\mu}$  — оператор магнитного момента,  $\vec{B}$  — магнитное поле световой волны, а  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  — операторы спинного и орбитального углового момента соответственно (заметим, что вектор  $\vec{l}$  не вносит вклада в переход  $S \rightarrow S$ , поэтому в нашем дальнейшем обсуждении этим членом можно пренебречь). Матричный элемент оператора  $H_{M1}$  между состояниями с различными главными квантовыми числами тождественно равен нулю, поскольку операторы углового момента не влияют на радиальные волновые функции, и радиальные волновые функции ортогональны для состояний с различными главными квантовыми числами. Ненулевой вклад в амплитуду M1, порядка  $10^{-4}\mu_0$ , возникает из вклада, смешивающего состояния  $6S_{1/2}$  и  $7S_{1/2}$  с состояниями, имеющими электроны, возбужденные из замкнутых оболочек (см., например, [Khriplovich (1991), гл. 5.1]), для описания эволюции которого требуются сложные атомные расчеты. В этой задаче нас интересует другой, зависящий от ядерного спина, вклад в амплитуду M1 сопоставимой величины, возникающий в результате недиагонального сверхтонкого взаимодействия (задача 1.11).

Показать, что индуцированная сверхтонким взаимодействием амплитуда M1 может быть связана со сверхтонким расщеплением  $\Delta E_{\text{hf}}$  верхнего и нижнего состояний (которые могут быть точно измерены) формулой [Hoffnagle (1982)]:

$$\langle n'S_{1/2}F'M' | \vec{\mu} | nS_{1/2}FM \rangle = 2\mu_0 \frac{\sqrt{\Delta E_{\text{hf}}^{n'} \Delta E_{\text{hf}}^n}}{E_{n'} - E_n} (F - F') \langle F'M' | \vec{s} | FM \rangle, \quad (3.259)$$

где знаки тильды обозначают состояния, смешанные сверхтонким взаимодействием.

Этот эффект оказывается важным при экспериментальных исследованиях нарушения четности в щелочных атомах, таких, как Cs (задача 1.13).

#### Решение

В случае  $s$ -электронов сверхтонкое взаимодействие между магнитными моментами электронов и ядер имеет контактную природу (*контактное взаимодействие Ферми*) с гамильтонианом вида (задача 1.4):

$$H_{\text{hf}} = c\delta(r)\vec{I} \cdot \vec{s}, \quad (3.260)$$

где  $c$  — константа,  $\delta(r)$  —  $\delta$ -функция, а  $\vec{I}$  — оператор ядерного спина. Гамильтониан (3.260) — это скалярный оператор по отношению к атомной волновой функции (Приложение F) и, следовательно, смешивает только состояния с одними и теми же

угловым моментом  $F$  и его проекцией  $M$  (а также, в общем случае, с одинаковыми квантовыми числами  $L$  и  $S$ , но не обязательно с тем же  $J$ , см. задачу 1.11):

$$\begin{aligned} |\widetilde{nS_{1/2}FM}\rangle &= \\ &= |nS_{1/2}FM\rangle + a_{\text{off}} \frac{\langle FM|\vec{I} \cdot \vec{s}|FM\rangle}{E_n - E_{n'}} |n'S_{1/2}FM\rangle = \end{aligned} \quad (3.261)$$

$$= |nS_{1/2}FM\rangle + \frac{a_{\text{off}}}{2} \frac{F(F+1) - I(I+1) - s(s+1)}{E_n - E_{n'}} |n'S_{1/2}FM\rangle, \quad (3.262)$$

$$\langle \widetilde{n'S_{1/2}F'M'} | = \langle n'S_{1/2}F'M' | + \frac{a_{\text{off}}}{2} \frac{F'(F'+1) - I(I+1) - s(s+1)}{E_{n'} - E_n} \langle nS_{1/2}F'M' |. \quad (3.263)$$

В выражениях (3.262) и (3.263)

$$a_{\text{off}} = c\psi_n(0)\psi_{n'}(0), \quad (3.264)$$

где  $\psi_n(0)$  и  $\psi_{n'}(0)$  — действительные волновые функции соответствующих  $s$ -состояний. Матричный элемент  $\vec{\mu} = -2\mu_0\vec{s}$  между состояниями (3.262) и (3.263) в этом случае имеет вид

$$\langle \widetilde{n'S_{1/2}F'M'} | \vec{\mu} | \widetilde{nS_{1/2}FM} \rangle = a_{\text{off}}\mu_0 \frac{F(F+1) - F'(F'+1)}{E_n - E_{n'}} \langle F'M' | \vec{s} | FM \rangle, \quad (3.265)$$

где мы воспользовались независимостью матричных элементов оператора  $\vec{s}$  от главного квантового числа. Заметим, что амплитуда M1 (3.265) обращается в ноль при  $F = F'$ . Поскольку  $l = 0$ , существует только две возможности получить  $F' \neq F$ :

- $F' = I + 1/2$ ;  $F = I - 1/2$ ;  $F' - F = 1$ , и
- $F' = I - 1/2$ ;  $F = I + 1/2$ ;  $F' - F = -1$ .

В любом случае получаем

$$F(F+1) - F'(F'+1) = (F - F')(2I + 1). \quad (3.266)$$

Последний шаг в выводе (3.259) состоит в том, чтобы связать  $a_{\text{off}}$  с расщеплениями сверхтонкой структуры. Используя гамильтониан (3.260), мы находим для сверхтонкого сдвига уровней:

$$E_{\text{hf}}^n(F) = \langle nF | c\delta(r)\vec{I} \cdot \vec{s} | nF \rangle = c\psi_n^2(0) \frac{F(F+1) - I(I+1) - s(s+1)}{2}, \quad (3.267)$$

откуда получаем

$$\Delta E_{\text{hf}}^n = E_{\text{hf}}^n(F = I + 1/2) - E_{\text{hf}}^n(F = I - 1/2) = c\psi_n^2(0)(I + 1/2), \quad (3.268)$$

и, аналогично, для  $n'$  и  $F'$ . Отсюда и из выражения (3.264) следует, что

$$a_{\text{off}} = \frac{\sqrt{\Delta E_{\text{hf}}^{n'} \Delta E_{\text{hf}}^n}}{I + 1/2}, \quad (3.269)$$

откуда, после подстановки в (3.265), совместно с (3.266), получаем искомое выражение (3.259).

## Глава 4

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТА С АТОМАМИ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

### 4.1. Резонансное фарадеевское вращение

Когда линейно поляризованный свет распространяется через среду, помещенную в магнитное поле, плоскость поляризации на выходе из среды оказывается повернутой (рис. 4.1). Этот эффект впервые наблюдался Майклом Фарадеем более 150 лет тому назад [Faraday (1855)]. В 1898 году итальянские физики Д. Макалузо и О.И. Корбино обнаружили, что фарадеевское вращение резонансно усиливается вблизи атомных линий поглощения [Macaluso и Corbino (1898)]<sup>1)</sup>.

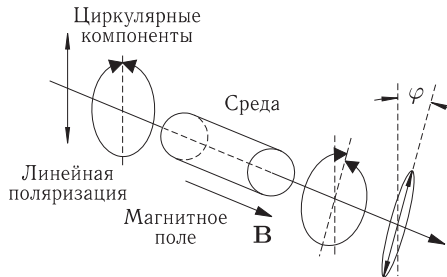


Рис. 4.1. Принципиальная схема установки для наблюдения фарадеевского вращения. Линейно поляризованный свет входит в среду, помещенную в продольное магнитное поле  $\mathbf{B}$ . Право- и левоциркулярно поляризованные (т.е. с правой и левой круговой поляризацией  $\sigma_-$  и  $\sigma_+$  соответственно) составляющие светового поля по мере распространения через среду приобретают различные фазовые сдвиги, что приводит к повороту плоскости поляризации на угол  $\varphi$ . (В общем случае две циркулярные компоненты светового поля испытывают также различное поглощение, что порождает на выходе из среды эллиптическую поляризацию)

Рассмотрим атомный переход  $F = 1 \rightarrow F' = 0$  (рис. 4.2);  $F$  и  $F'$  — полные угловые моменты верхнего и нижнего состояний соответственно. Допустим, что ширина перехода определяется скоростью спонтанного распада верхнего состояния  $\gamma_0$  (т.е. отсутствуют иные механизмы уширения, включая доплеровское) и длина атомной среды равна  $l_0$ . Магнитное поле направлено вдоль направления распространения

<sup>1)</sup> Это явление известно как *резонансный линейный эффект Фарадея*, или как *эффект Макалузо–Корбино*. Эффект Макалузо–Корбино считается эффектом линейным, поскольку при достаточно низких мощностях светового потока вращение не зависит от интенсивности света. (Для детального обсуждения эффекта Фарадея и других близких явлений см. недавний обзор линейных и нелинейных магнитооптических эффектов [Budker и др. (2002)].)



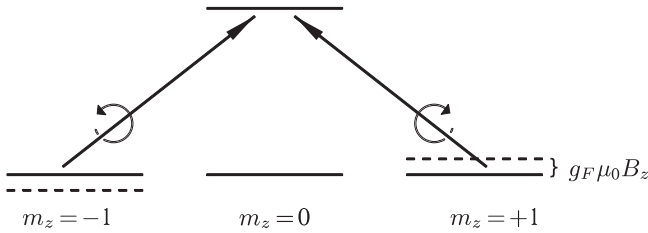


Рис. 4.2. Схема уровней энергии для атомного перехода  $F = 1 \rightarrow F' = 0$ . Зеемановские подуровни смещаются в присутствии магнитного поля, меняя частоты резонансных переходов для правой и левой круговой поляризации света

света. Получить зависимость угла фарадеевского вращения  $\varphi$  от магнитного поля и отстройки частоты света  $\omega$  от частоты атомного резонанса  $\omega_0$ .

### Подсказка

Для этой задачи удобно выбрать ось квантования, направленную вдоль магнитного поля, т. е. вдоль направления распространения света.

### Решение

Линейно поляризованный свет, падающий на атомную среду, можно разложить на лево- ( $\sigma_+$ ) и право- ( $\sigma_-$ ) циркулярно поляризованные составляющие. Когда магнитное поле  $B_z$  приложено к образцу вдоль направления распространения света (продольное направление  $z$ ), зеемановские сдвиги между соседними магнитными подуровнями ( $= g_F \mu_0 B_z$ , где  $g_F$  — фактор Ланде, а  $\mu_0$  — магнетон Бора) делают различными показатели преломления для  $\sigma_+$ - и  $\sigma_-$ -поляризованного света (циркулярное двулучепреломление). Это, в свою очередь, приводит к изменению относительных фаз циркулярно поляризованных компонент по мере их распространения через среду, приводя к оптическому вращению плоскости поляризации.

Для случая отсутствия доплеровского уширения и спектрально узкого света, в отсутствие магнитного поля, комплексный показатель преломления  $n(\omega)$  может быть описан контуром лоренцева типа (см., например, [Griffiths (1999)] и задачи 3.1 и 3.31)

$$n(\omega) \approx 1 + 2\pi\chi_0 \frac{\gamma_0}{2(\omega - \omega_0) + i\gamma_0}, \quad (4.1)$$

где  $\chi_0$  — амплитуда линейной восприимчивости<sup>1)</sup>. Магнитное поле сдвигает резонансные частоты для двух циркулярных компонент, и показатели преломления  $n_{\pm}(\omega)$  для левой и правой циркулярных поляризаций в присутствии продольного магнитного поля приобретают вид

$$n_{\pm}(\omega) \approx 1 + 2\pi\chi_0 \frac{\gamma_0}{2(\omega - \omega_0 \mp g_F \mu_0 B_z) + i\gamma_0}. \quad (4.2)$$

<sup>1)</sup> Заметим, что существует ряд полезных способов описания показателя преломления через различные физические характеристики, такие, как линейная восприимчивость  $\chi$ , микроскопическая атомная поляризуемость  $\alpha$  (см. задачи 2.1 и 2.2) и диэлектрическая постоянная  $\epsilon$ , а именно

$$n = \sqrt{\epsilon} = \sqrt{1 + 4\pi\chi} \approx 1 + 2\pi\chi = 1 + 2\pi N\alpha,$$

где  $N$  — концентрация атомов.

Согласно (4.2) различие показателей преломления для  $\sigma_+$  и  $\sigma_-$  света дается выражением

$$n_+(\omega) - n_-(\omega) = -2\pi\chi_0 \frac{4g_F\mu_0 B_z/\gamma_0}{(2g_F\mu_0 B_z/\gamma_0)^2 + \left(1 - 2i\left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma_0}\right)\right)^2}. \quad (4.3)$$

Положение плоскости поляризации света определяется относительной фазой двух циркулярных компонент. Например,

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\epsilon}_- - \hat{\epsilon}_+), \\ \hat{\epsilon}_y &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{\epsilon}_+ + \hat{\epsilon}_-), \end{aligned} \quad (4.4)$$

где  $\hat{\epsilon}_x$  и  $\hat{\epsilon}_y$  описывают поляризацию света вдоль направлений  $x$  и  $y$  соответственно.

Допустим, что свет первоначально поляризован по оси  $x$ . Тогда электрическое поле световой волны может быть записано в виде

$$\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_0 \hat{\epsilon}_x \cos(kz - \omega t) = \quad (4.5)$$

$$= \frac{\mathcal{E}_0}{2} \left[ \frac{\hat{\epsilon}_-}{\sqrt{2}} e^{i(k_- z - \omega t)} - \frac{\hat{\epsilon}_+}{\sqrt{2}} e^{i(k_+ z - \omega t)} \right] + \text{с. с.}, \quad (4.6)$$

где  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда электрического поля световой волны, с. с. обозначает комплексное сопряжение, а величина волнового вектора  $k_{\pm}$  определяется формулой

$$k_{\pm} = \frac{n_{\pm}\omega}{c}. \quad (4.7)$$

Мнимая часть волнового вектора отвечает за поглощение, а действительная часть — за преломление. Различие в поглощении двух циркулярных компонент делает свет эллиптически поляризованным (рис. 4.1). Различие вещественных частей показателей преломления приводит к оптическому вращению.

По мере распространения света через атомные пары набег фазы между циркулярными компонентами растет по закону

$$\phi = \frac{\omega \ell}{c} \cdot \text{Re}(n_+ - n_-), \quad (4.8)$$

где  $\ell$  — длина пути в атомной среде. Если  $\phi = \pi$ , то первоначально  $x$ -поляризованный свет становится  $y$ -поляризованным, т. е.

$$\varphi = \frac{\phi}{2}. \quad (4.9)$$

И наконец, мы можем подставить наше выражение для индуцированной магнитным полем разности показателей преломления для  $\sigma_{\pm}$ -поляризаций (формула (4.3)) в (4.9) и найти зависимость фарадеевского вращения от магнитного поля и от частотной отстройки света от резонанса  $\Delta = \omega - \omega_0$ :

$$\varphi = \frac{2\pi\chi_0\omega\ell}{c} \cdot \frac{b[1 + b^2 - (2\Delta/\gamma_0)^2]}{(2\Delta/\gamma_0)^2 + [1 + b^2 - (2\Delta/\gamma_0)^2]^2}, \quad (4.10)$$

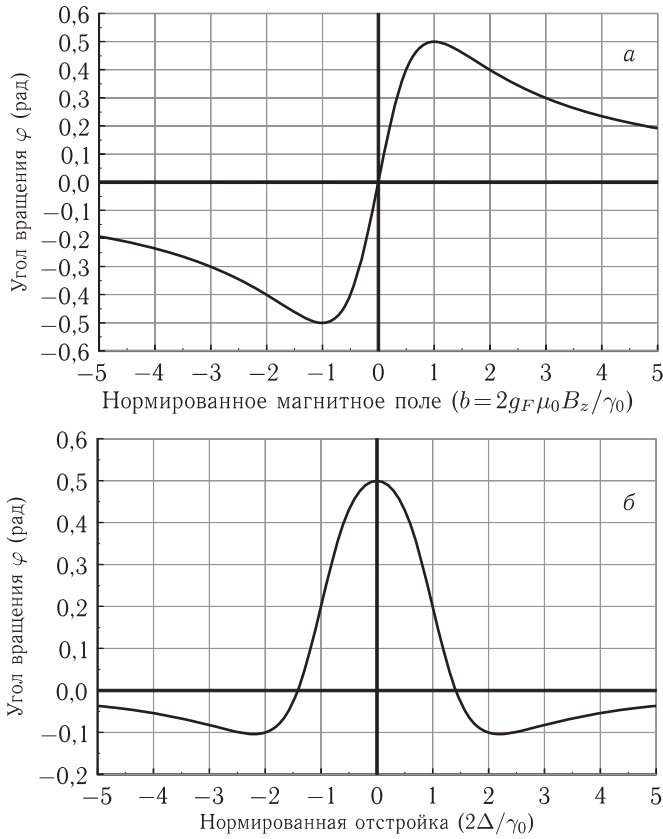


Рис. 4.3. Магнитооптическое вращение для единичной длины поглощения ( $\ell = \ell_0$ ): *a* — угол магнитооптического вращаения  $\varphi$  как функция продольного магнитного поля для случая нулевой расстройки ( $\omega = \omega_0$ ); *б* — угол вращения как функция расстройки при  $b = 1$  (т. е.  $B_z = \gamma_0/(2g_F\mu_0)$ )

где  $b = 2g_F\mu_0 B_z/\gamma_0$ . Соотношение (4.10) можно представить в виде зависимости от длины поглощения  $\ell_0 = (4\pi\chi_0\omega/c)^{-1}$  в резонансе (определенной для  $B_z = 0$  понятие длины поглощения обсуждается в задаче 3.5). На рис. 4.3 приведены зависимости фарадеевского вращаения от магнитного поля и от частотной отстройки света<sup>1)</sup>.

При  $\Delta = 0$  мы получаем

$$\varphi = \frac{2\pi\chi_0\omega\ell}{c} \frac{b}{1+b^2} = \frac{\ell}{2\ell_0} \frac{b}{1+b^2}. \quad (4.11)$$

<sup>1)</sup> В пределе  $b \ll 1$  угол вращения обращается в ноль при  $|\omega - \omega_0| = \gamma_0/2$ . В экспериментальных ситуациях, когда однородное уширение  $\gamma$  превосходит неоднородное (например, при исследованиях уширения давлением газа), это свойство обеспечивает удобный способ измерения однородной ширины перехода. Важно также, что расстояние между точками пересечения поля линейно зависит от  $\gamma$  даже в случае, когда  $\gamma$  много меньше неоднородной ширины.

Интересно отметить, что интеграл вращения по частотной расстройке равен нулю (рис. 4.3 б). Это происходит потому, что фарадеевское вращение является результатом относительного сдвига показателей преломления для лево- и правополяризованно поляризованного света и частотный интеграл по каждому из них равен нулю.

## 4.2. Эффект Керра в атомной среде

Если прозрачная изотропная среда подвергается воздействию внешнего электрического поля, то поле индуцирует в среде одноосную анизотропию, которая меняет ее оптические свойства. В частности показатели преломления для света, поляризованного вдоль и поперек поля, будут различаться (эффект Керра). Это различие показателей преломления может быть зарегистрировано, например, путем измерения

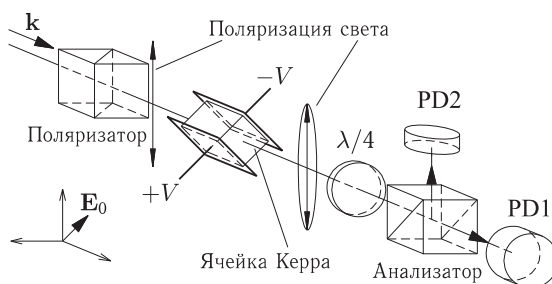


Рис. 4.4. Упрощенная схема измерения эффекта Керра. PD1 и PD2 — фотоприемники. Печатается с разрешения В. В. Ящука

эллиптичности, индуцируемой в световом пучке, исходно линейно поляризованном под углом  $45^\circ$  к направлению поля (рис. 4.4):

$$\varepsilon = KE^2 \frac{\pi l}{\lambda}, \quad (4.12)$$

где  $K$  — постоянная Керра,  $E$  — приложенное поле,  $l$  — длина среды, а  $\lambda$  — длина волны света в вакууме. Из выражения 4.12 видно, что константа Керра может быть вычислена из разности показателей преломления для света, поляризованного параллельно и перпендикулярно направлению приложенного статического электрического поля:

$$KE^2 = n_{\parallel} - n_{\perp}. \quad (4.13)$$

Определить константу Керра  $K$  для следующих систем, предполагая энергетическую структуру типа  $1s^2 \ ^1S_0$  ( $|1S\rangle$ ),  $1s2p \ ^1P_1$  ( $|2P\rangle$ ) и  $1s2s \ ^1S_0$  ( $|2S\rangle$ ) в атоме гелия, для света ближнего ИК и видимого диапазонов. Заметим, что частота излучения в этом случае далеко отстоит от резонанса  $|1S\rangle \rightarrow |2P\rangle$ :

- (а) Двухуровневый атом (состояния  $|1S\rangle$  и  $|2P\rangle$ ).
- (б) Трехуровневый атом (все три вышеупомянутых состояния).
- (в) Оценить по порядку величины константу Керра жидкого гелия.

### Подсказка

Плотность жидкого гелия  $\approx 0,1$  г/см<sup>3</sup>. Показатель преломления жидкого гелия  $n$  составляет приблизительно 1,028, а время жизни состояния  $|2P\rangle$  для свободного атома гелия (лежащее приблизительно на 21,22 эВ выше основного состояния) составляет  $\approx 0,56$  нс. Электрические дипольные матричные элементы, связывающие состояние  $|2P, M=0\rangle$  с состояниями  $|2S\rangle$  ( $d_2$ ) и  $|1S\rangle$  ( $d_1$ ), имеют соотношение  $d_2/d_1 \approx 6,9$ .

### Решение

(а) Мы будем вычислять константу Керра следующим образом. Сначала найдем зависящий от поляризации света энергетический сдвиг  $\delta$  нижнего состояния в присутствии статического электрического поля. Затем свяжем этот сдвиг с показателем преломления, пользуясь следующим соотношением:

$$\delta = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2, \quad (4.14)$$

где  $\alpha$  — поляризуемость (см. задачи 2.1 и 2.2), а  $\alpha \mathcal{E}$  — величина дипольного момента, индуцируемая в атоме световым электрическим полем величиной  $\mathcal{E}$  (множитель  $1/2$  возникает в выражении (4.14) по той причине, что сам магнитный момент пропорционален приложенному полю, см., например, задачу 2.14), и

$$n = \sqrt{\epsilon} \approx 1 + 2\pi N\alpha, \quad (4.15)$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды, а  $N$  — концентрация атомов. (Выражение (4.15) следует из того факта, что электрическая индукция имеет вид  $\mathcal{D} = \epsilon \mathcal{E} = \mathcal{E} + 4\pi N\alpha$ .)

Если мы примем направление приложенного статического поля  $\vec{E}$  за ось квантования, то влияние этого поля сведется к сдвигу основного состояния вниз на величину  $d_1^2 E^2 / \hbar \omega_P$  (где  $\omega_P$  — частота перехода  $|1S\rangle \rightarrow |2P\rangle$ ) и к сдвигу зеемановского подуровня  $M=0$  верхнего состояния вверх на ту же величину (см. выражение (2.21) в задаче 2.2). Волновые функции нижнего состояния и компоненты  $M=0$  верхнего состояния, смешанные приложенным электрическим полем (получаемые путем разложения решений двухуровневого секулярного уравнения по малому смешивающему параметру  $d_1 E / (\hbar \omega_P)$ , см. задачу 1.4 (б)) имеют вид

$$|a\rangle \approx \left(1 - \frac{1}{2} \frac{d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right) |1S\rangle - \frac{d_1 E}{\hbar \omega_P} |2P, M=0\rangle, \quad (4.16)$$

$$|b\rangle \approx \frac{d_1 E}{\hbar \omega_P} |1S\rangle + \left(1 - \frac{1}{2} \frac{d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right) |2P, M=0\rangle. \quad (4.17)$$

(Отметим, что множители  $1/2$ , стоящие в этих выражениях перед членами  $d_1^2 E^2 / (\hbar^2 \omega_P^2)$ , являются результатом нормировки волновых функций  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ , и мы сохраняем в разложении только члены до второго порядка по  $E$ .)

Дипольный момент можно вычислить, исходя из времени жизни, с помощью соотношения (см. задачу 3.3)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4\omega_P^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{2J'+1} |\langle 1S || d || 2P \rangle|^2, \quad (4.18)$$

где  $J' = 1$  — полный угловой момент верхнего состояния, а  $\langle 1S||d||2P \rangle$  — приведенный дипольный момент (теорема Вигнера–Эккарта (Приложение F) связывает матричный элемент  $\langle 1S||d||2P \rangle$  с  $d_1$ ). Выполняя эти вычисления, получаем

$$d_1 = \frac{|\langle 1S||d||2P \rangle|}{\sqrt{3}} \approx 0,42 \, ea_0. \quad (4.19)$$

Рассмотрим теперь случай светового поля  $\omega_{\mathcal{E}}$ , параллельного направлению статического электрического поля. Используя волновые функции (4.16) и (4.17), возмущенные статическим полем, в качестве нового базиса, мы находим дипольный момент перехода между верхним и нижним состояниями:

$$d_{ab} = \langle b|d|a \rangle = \left(1 - \frac{2d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right) d_1. \quad (4.20)$$

Световое поле связывает состояния  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ , вызывая светоиндуцированный сдвиг

$$\delta_{\parallel} \approx -\frac{d_{ab}^2 \mathcal{E}^2}{\hbar \omega_P + 2 \frac{d_1^2 E^2}{\hbar \omega_P}} \approx \quad (4.21)$$

$$\approx -\frac{d_1^2 \mathcal{E}^2}{\hbar \omega_P} \left(1 - \frac{2d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right)^2 \left(1 - 2 \frac{d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right) \approx \quad (4.22)$$

$$\approx -\frac{d_1^2 \mathcal{E}^2}{\hbar \omega_P} \left(1 - \frac{6d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right), \quad (4.23)$$

где мы приняли, что  $\omega_P - \omega_{\mathcal{E}} \approx \omega_P$ .

Аналогичные расчеты для света, поляризованного перпендикулярно направлению статического поля, дают:

$$\delta_{\perp} \approx -\frac{d_1^2 \mathcal{E}^2}{\hbar \omega_P} \left(1 - \frac{2d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right). \quad (4.24)$$

Из (4.14) и (4.15) видно, что величина  $n - 1$  пропорциональна светоиндуцированному сдвигу:

$$n - 1 \approx 2\pi N \alpha = -4\pi N \frac{\delta}{\mathcal{E}^2}. \quad (4.25)$$

Мы имеем

$$n_{\parallel} - n_{\perp} \approx \frac{4\pi N}{\mathcal{E}^2} (\delta_{\perp} - \delta_{\parallel}) \approx \quad (4.26)$$

$$\approx -4\pi N \frac{d_1^2}{\hbar \omega_P} \left(\frac{4d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2}\right) = \quad (4.27)$$

$$= -\frac{4d_1^2 E^2}{\hbar^2 \omega_P^2} (n - 1), \quad (4.28)$$

где мы определяем  $n - 1 = 4\pi N d_1^2 / (\hbar \omega_P)$  как показатель преломления в отсутствие статического поля.

Следовательно из (4.3) мы получаем

$$K \approx -\frac{4d_1^2}{\hbar^2 \omega_P^2} (n-1). \quad (4.29)$$

**(6)** В приведенных выше расчетах мы пренебрегли влиянием состояния  $|2S\rangle$  атома Не. Энергетически это состояние очень близко к состоянию  $|2P\rangle$  и, фактически, дает основной вклад в его электрическую поляризуемость. Поэтому состояние  $|2S\rangle$  является чрезвычайно важным для реалистичного рассмотрения этой задачи.

Ответственное за эффект Керра взаимодействие света со средой можно рассматривать как  $(\chi^{(3)})$  процесс нелинейного оптического четырехволнового смещения<sup>1)</sup>, при котором три низкочастотных поля ( $\mathcal{E}$ ,  $E$  и  $E$ ) создают новое поле ( $\mathcal{E}'$ ). Процессы этого типа могут быть представлены в виде диаграмм поглощения–испускания, а также в виде диаграмм Фейнмана (см., например, [Delone и Krainov (1988)] и Приложение Н), примеры которых показаны на рис. 4.5.

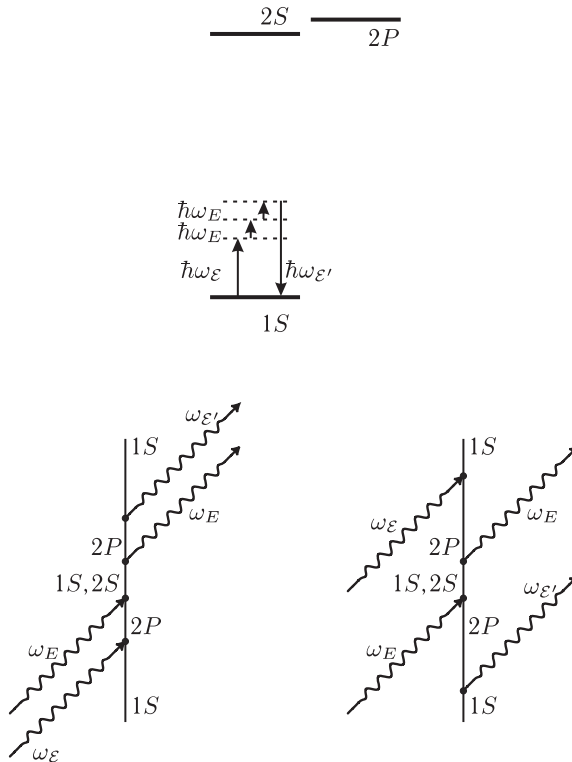


Рис. 4.5. Эффект Керра как процесс четырехволнового смещения. Эффект Керра в статическом поле получен в приближении  $\omega_E \rightarrow 0$ ;  $\omega_{\mathcal{E}'} \rightarrow \omega_{\mathcal{E}}$ . Как показывается в тексте, состояние  $|2S\rangle$  играет в этом процессе важную роль, несмотря на то, что оно непосредственно не связывается с состоянием  $|1S\rangle$  и отсутствует резонансное усиление эффекта

<sup>1)</sup> В качестве введения в нелинейную оптику мы рекомендуем книгу [Boyd (2003)].

Сравним амплитуду, отвечающую диаграмме с состоянием  $|1S\rangle$  в качестве промежуточного, с амплитудой диаграммы с промежуточным состоянием  $|2S\rangle$  (перестановки статических полей ничего не меняют, и мы их не рассматриваем). Используя правила диаграммной техники Фейнмана (Приложение Н), мы можем выписать вершины и пропагаторы для случая с состоянием  $|1S\rangle$  ( $\omega_E = \omega_{E'}$ ):

$$V_{1S} \propto \frac{d_1^4}{(\omega_P - \omega_E)(-\omega_E)(\omega_P - \omega_E)} + \frac{d_1^4}{(\omega_P + \omega_E)(\omega_E)(\omega_P + \omega_E)} \approx -\frac{4d_1^4}{\omega_P^3}. \quad (4.30)$$

Для случая промежуточного состояния  $|2S\rangle$  имеем

$$V_{2S} \propto \frac{d_1^2 d_2^2}{(\omega_P - \omega_E)(\omega_{2S} - \omega_E)(\omega_P - \omega_E)} + \frac{d_1^2 d_2^2}{(\omega_P + \omega_E)(\omega_{2S} + \omega_E)(\omega_P + \omega_E)} \approx \frac{2d_1^2 d_2^2}{\omega_P^3}. \quad (4.31)$$

Сравнивая эти две амплитуды, мы видим, что, поскольку  $d_2 \approx 6,9 d_1$ , амплитуда диаграммы с промежуточным состоянием  $|2S\rangle$  превосходит амплитуду с промежуточным состоянием  $|1S\rangle$  приблизительно в 24 раза. Следовательно, амплитудой с промежуточным состоянием  $|1S\rangle$  мы можем пренебречь. Заметим, что хотя каждая отдельная диаграмма с состоянием  $1S$  «резонансно» усиливается из-за малой величины  $\omega_E$  в знаменателе, две диаграммы, отличающиеся порядком следования событий поглощения и излучения световых квантов, почти взаимно уничтожаются. Важно также обратить внимание на тот факт, что влияние на фазу света, которым мы интересуемся, пропорционально амплитуде рассеяния вперед, определяемой диаграммой Фейнмана, а не квадратом амплитуды.

И наконец, на основе результатов наших расчетов  $V_{1S}$  и  $V_{2S}$  для трехуровневой системы вместо (4.29) мы можем написать

$$K \approx \frac{2d_2^2}{\hbar^2 \omega_P^2} (n - 1) \quad (4.32)$$

после замены множителя  $-4d_1^2$  в (4.29) на множитель  $+2d_2^2$ .

**(в)** Для искомой оценки мы будем моделировать жидкость ансамблем свободных атомов (такая модель работает для гелия, но, вообще говоря, является плохим приближением для молекулярных жидкостей). Подставляя значения  $d$ ,  $\hbar\omega_P$  и  $n$ , приведенные в подсказке, получаем

$$K \approx 2 \cdot 10^{-14} \text{ (кВ/см)}^{-2}. \quad (4.33)$$

Если в качестве числового примера для установки, показанной на рис. 4.4, взять образец длиной 10 см,  $\lambda = 1$  мкм и  $E = 50$  кВ/см, то для индуцированной эллиптичности получим  $\epsilon \sim 2 \cdot 10^{-5}$ .

Это оценка эффекта только по порядку величины, поскольку оптические свойства реальной Не-системы не могут быть адекватно описаны в рамках принятой здесь трехуровневой модели. Фактически показатель преломления в этой модели дается соотношением (используя формулы (4.14) и (4.15); состояние  $|2S\rangle$  в этой оценке роли не играет):

$$n - 1 \approx \frac{4\pi N d_1^2}{\hbar\omega_P}. \quad (4.34)$$



Подставляя соответствующие значения для жидкого гелия, мы находим  $n - 1 \approx 8 \times 10^{-3}$ , что в 4 раза меньше экспериментального значения для газообразного гелия с поправочным фактором на плотность жидкого гелия.

### 4.3. Эффект Ханле

Рассмотрим постановку опыта в геометрии, изображенной на рис. 4.6, когда ансамбль атомов с угловым моментом основного состояния  $J = 0$  располагается в малом объеме в начале системы координат. В момент времени  $t = 0$  атомы облучаются коротким импульсом циркулярно поляризованных фотонов, вызывающих переход в возбужденное состояние с  $J = 1$ . Атомы находятся в магнитном поле  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ . Поскольку падающий свет циркулярно поляризован, в первый момент времени возбужденные атомы имеют проекцию углового момента на ось  $\hat{x}$ , равную  $\hbar$  (или  $-\hbar$ ). Однако во внешнем поле вектор поляризации прецессирует с частотой  $\Omega_L$  (ларморова частота, пропорциональная  $B_0$ ), поскольку возбужденные атомы обладают магнитными моментами (см., например, задачу 2.6). Возбужденное состояние имеет время жизни  $\tau = 1/\gamma$ . Когда атом переходит в основное состояние, он может излучить фотон в телесный угол, охваченный детектором, расположенным вдоль оси  $y$ . Детектор снабжен циркулярным анализатором, так что он регистрирует только фотоны флуоресценции с положительной спиральностью ( $\sigma_+$ ).

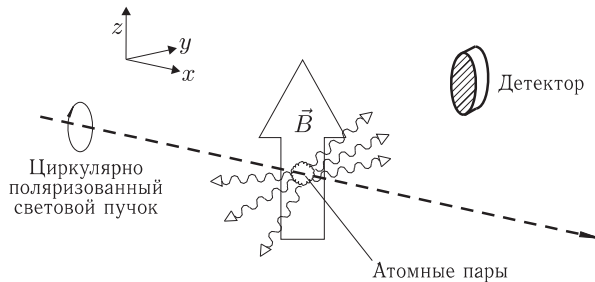


Рис. 4.6. Схема установки для экспериментального исследования эффекта Ханле. Атомные пары, расположенные в начале системы координат, освещаются импульсом циркулярно поляризованного света, распространяющегося вдоль оси  $\hat{x}$ . Фотодетектор, снабженный циркулярным анализатором, располагается по оси  $y$ . Внешнее магнитное поле  $\vec{B}$  направлено вдоль оси  $\hat{z}$

Как выглядит временная зависимость регистрируемого сигнала? Как меняется сигнал при изменении знака циркулярной поляризации возбуждающих фотонов, а также при изменении напряженности приложенного поля  $B_0$ ? Объяснить, как можно использовать описанное явление, известное как *эффект Ханле*, для измерения времени жизни возбужденного состояния.

### Решение

В этой задаче удобно использовать различные оси квантования на различных стадиях решения задачи. Для описания населенности возбужденного состояния мы направим ось квантования по оси  $\hat{x}$ . Тогда состояния с  $J = 1$ , возбуждаемые лево-

и право- ( $\sigma_+$  и  $\sigma_-$ , соответственно) циркулярно поляризованными фотонами будут иметь простой вид

$$|J = 1, m = 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

$$|J = 1, m = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

соответственно.

Поскольку магнитное поле направлено вдоль оси  $\hat{z}$ , то для описания процесса прецессии удобно выбрать ось квантования вдоль  $z$ . Отметим, что соответствующая система координат может быть получена из той, которой мы пользовались для описания населенности, путем эйлеровых вращений ( $\alpha = 0$ ,  $\beta = -\pi/2$ ,  $\gamma = 0$ ), описываемых следующей (для  $J = 1$ ) поворотной матрицей  $\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma)$  (Приложение Е):

$$\mathcal{D}(0, -\pi/2, 0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

Применяя матрицу  $\mathcal{D}(0, -\pi/2, 0)$  к состояниям  $|J = 1, m = \pm 1\rangle$ , получаем

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

где два знака отвечают двум возможным состояниям поляризации падающих фотонов. Согласно зависящему от времени уравнению Шрёдингера, временная эволюция этой волновой функции описывается выражением

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-\gamma t/2}}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega_L t} \\ \pm\sqrt{2} \\ e^{i\Omega_L t} \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Здесь  $\Omega_L = g\mu_0 B_0$  — ларморова частота ( $g$  — соответствующий фактор Ланде), и мы учли амплитудное затухание (т.е.  $\gamma/2$ , а не  $\gamma$  в экспоненциальном множителе), обусловленное естественным временем жизни возбужденного состояния. И, наконец, процесс детектирования удобнее всего описывать в системе координат с осью квантования вдоль  $y$ . Эта система координат может быть получена из предыдущей путем эйлеровских вращений ( $\alpha = \pi/2$ ,  $\beta = \pi/2$ ,  $\gamma = 0$ ), и волновая функция в новой

системе координат приобретает вид (см. Приложение Е):

$$|\psi'(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{-\gamma t/2}}{2} \begin{pmatrix} ie^{-i\Omega_L t} \\ \pm\sqrt{2} \\ -ie^{i\Omega_L t} \end{pmatrix} = \quad (4.40)$$

$$= \begin{pmatrix} \pm\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin \Omega_L t \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \Omega_L t \\ \mp\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin \Omega_L t \end{pmatrix} e^{-\gamma t/2}. \quad (4.41)$$

Сигнал детектора  $S(t)$  пропорционален населенности подуровня  $m = 1$  и скорости спонтанного распада:

$$S(t) \propto \frac{\gamma}{4} (1 \pm \sin \Omega_L t)^2 e^{-\gamma t}. \quad (4.42)$$

Эта формула описывает затухающий осциллирующий сигнал: детектор видит максимальный сигнал, когда угловой момент, прецессируя, «смотрит» на детектор<sup>1)</sup>. Если временное разрешение детектора существенно выше чем  $1/\gamma$ , время жизни может быть измерено путем подгонки наблюдаемой временной зависимости к ожидаемой зависимости, полученной выше, используя  $\gamma = 1/\tau$  как свободный параметр.

При низком временном разрешении детектора (или при малом времени жизни возбужденного состояния) время жизни может быть определено путем измерения зависимости интегрального по времени сигнала от магнитного поля. Проинтегрированный по времени сигнал описывается выражением

$$S(\Omega_L) \propto \int_0^\infty S(t) dt = \frac{\gamma}{4} \left( \frac{3}{2\gamma} \pm 2 \frac{\Omega_L}{\gamma^2 + \Omega_L^2} - \frac{1}{2} \frac{\gamma}{\gamma^2 + 4\Omega_L^2} \right). \quad (4.43)$$

На рис. 4.7 показан сигнал  $S(\Omega_L)$  как функция ларморовой частоты. Отметим, что характеристическая ширина дисперсионной части контура равна  $\gamma$ .

#### 4.4. Индуцированный электрическим полем распад состояния $2^2S_{1/2}$ атома водорода

В атоме водорода состояние  $2^2S_{1/2}$  лежит энергетически выше, чем состояние  $2^2P_{1/2}$  на величину  $\delta$  лэмбовского сдвига, равную 1058 МГц. В отсутствие внешних электрических полей состояние  $2^2S_{1/2}$  имеет очень большое естественное время жизни ( $\approx 1/8$  с) и переходит в основное состояние  $1^2S_{1/2}$  через процесс двухфотонного распада. Состояние  $2^2P_{1/2}$  характеризуется коротким временем жизни ( $\tau_{2P} \approx 1,6 \times$

<sup>1)</sup> Это утверждение справедливо, когда  $\Omega_L \gg \gamma$ . При больших  $\gamma$  процесс затухания смещает максимум интенсивности сигнала.

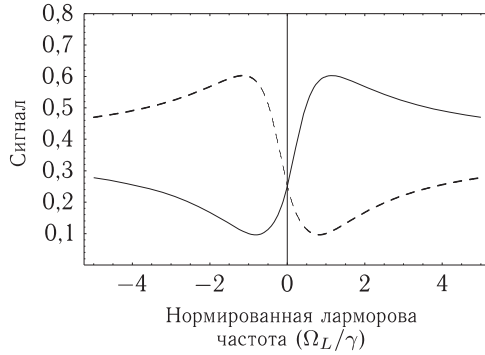


Рис. 4.7. Интегрированный по времени сигнал Ханле, представленный как функция ларморовой частоты для левой и правой круговой поляризации возбуждающего света (сплошная и штриховая кривые соответственно). Подгонка к этим кривым позволяет получить время жизни возбужденного состояния

$\times 10^{-9}$  с), поскольку оно имеет возможность перейти в основное состояние путем однофотонного электрического дипольного (E1) перехода (линия  $\alpha$  Лаймана). При приложении внешнего электрического поля состояние  $2^2S_{1/2}$  приобретает примесь состояния  $2^2P_{1/2}$ , и его время жизни сокращается.

(а) Для слабого электрического поля  $\mathcal{E}$  показать, что скорость распада состояния  $2^2S_{1/2}$  дается формулой

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3\gamma e^2 a_0^2 \mathcal{E}^2}{\hbar^2 (\omega_{sp}^2 + \gamma^2/4)}, \quad (4.44)$$

где  $\omega_{sp} = 2\pi\delta$ ,  $\delta$  — лэмбовский сдвиг. Указать, какое электрическое поле может считаться «слабым».

(б) Определить  $\tau$  при  $\mathcal{E} = 10$  В/см.

### Решение

(а) Пусть электрическое поле приложено вдоль оси  $\hat{z}$ . Рассмотрим двухуровневую систему, образованную состояниями  $|2^2S_{1/2}, M_J = 1\rangle$  и  $|2^2P_{1/2}, M_J = 1\rangle$  (для упрощения обозначений мы будем в дальнейшем обозначать состояние  $2^2S_{1/2}$  как  $2S$ , а состояние  $2^2P_{1/2}$  как  $2P$ ). Гамильтониан этой системы в присутствии электрического поля имеет вид (где мы положили  $\hbar = 1$ ):

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \omega_{sp} & -d\mathcal{E} \\ -d\mathcal{E} & -i\gamma/2 \end{pmatrix}. \quad (4.45)$$

Здесь энергия невозмущенного состояния  $2^2P_{1/2}$  выбрана равной нулю (мы пренебрегаем шириной состояния  $2S$ ), а дипольный момент  $d$  описывается выражением

$$d = -e\langle 2S, M_J = 1/2 | z | 2P, M_J = 1/2 \rangle = \quad (4.46)$$

$$= -e\langle 2, 0, 0 | \langle + | z \left( \sqrt{\frac{2}{3}} |2, 1, 1\rangle | - \right) - \sqrt{\frac{1}{3}} |2, 1, 0\rangle | + \rangle \rangle = \quad (4.47)$$

$$= \frac{e}{\sqrt{3}} \langle 2, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle = \frac{e}{\sqrt{3}} \langle 2, 0, 0 | r \cos \theta | 2, 1, 0 \rangle, \quad (4.48)$$

где мы использовали обозначения  $|n, l, m_l\rangle$  для пространственных волновых функций, а для электронных спиновых состояний мы пользуемся общепринятыми обозначениями  $|m_s = \pm 1/2\rangle = |\pm\rangle$ . Мы можем получить выражение для  $d$ , используя соответствующие волновые функции атома водорода (выражения (1.261) и (1.263)):

$$\begin{aligned}\psi_{210}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta, \\ \psi_{200}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0},\end{aligned}$$

и проводя интегрирование. Мы находим, что

$$d = -\sqrt{3} \ e a_0. \quad (4.49)$$

Возвращаясь к матрице гамильтониана  $\mathbf{H}$ , мы видим, что поскольку возмущение, вносимое электрическим полем, является недиагональным, оно не вызывает, в первом порядке, энергетических сдвигов уровней. Однако волновые функции обнаруживают поправки первого порядка. Возмущенная волновая функция  $|\widetilde{2S}\rangle$ , соответствующая состоянию  $2S$ , может быть найдена путем подстановки  $\lambda \approx \omega_{sp}$  (поскольку энергия в первом приближении не меняется) в секулярное уравнение

$$\begin{pmatrix} \omega_{sp} - \lambda & -d\mathcal{E} \\ -d\mathcal{E} & -i\gamma/2 - \lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0, \quad (4.50)$$

где  $b$  ( $|b| \ll |a|$ ) — малая амплитуда примеси состояния  $2P$  к состоянию  $2S$ . Выражение (4.50) показывает, что

$$\frac{b}{a} \approx \frac{d\mathcal{E}}{\omega_{sp} + i\gamma/2}. \quad (4.51)$$

Скорость распада состояния  $|\widetilde{2S}\rangle$  определяется произведением относительной вероятности обнаружения атома в примесном состоянии  $2P$  на скорость его распада:

$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \gamma \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{\omega_{sp}^2 + \gamma^2/4} = \frac{3\gamma e^2 a_0^2 \mathcal{E}^2}{\hbar^2 (\omega_{sp}^2 + \gamma^2/4)}}, \quad (4.52)$$

как и предсказывалось. Условие «слабого» поля имеет вид

$$\boxed{|d\mathcal{E}| \ll \omega_{sp}}. \quad (4.53)$$

В противоположном случае, когда  $|d\mathcal{E}| \gg \omega_{sp}$ , время жизни не зависит от  $\mathcal{E}$ , поскольку состояния  $2S$  и  $2P$  являются полностью смешанными, и время жизни обоих состояний  $\approx 2\tau$ .

**(б)** Параметры в выражении (4.52) имеют следующие значения:

$$\omega_{sp} = 2\pi \times 1,058 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}; \quad (4.54)$$

$$\gamma = 6 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}; \quad (4.55)$$

$$\mathcal{E} = 10 \text{ В/см} = \frac{1}{30} \text{ СГС/см}; \quad (4.56)$$

откуда имеем

$$\boxed{\tau = 3,8 \text{ мкс.}} \quad (4.57)$$

#### 4.5. Переходы, индуцированные эффектом Штарка (У)

Однофотонные электрические дипольные ( $E1$ ) переходы между состояниями  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$  одной четности запрещены (в пренебрежении эффектами несохранения четности (НСЧ), которые обычно крайне малы, см. ниже, а также задачу 1.13). Однако, ненулевая амплитуда перехода  $E1$  между такими состояниями может быть индуцирована внешним статическим электрическим полем  $\vec{E}$ , которое примешивает состояние противоположной четности к каждому из состояний  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$ .

Такие переходы, индуцированные эффектом Штарка, использовались в нескольких экспериментах по нарушению четности в атомах (см., например, [Conti и др. (1979), Bouchiat и др. (1982), Wood и др. (1997), Nguyen и др. (1997), Guéna и др. (2003)]). Скорость перехода  $W$  между состояниями той же четности имеет вклады как от амплитуд индуцированных эффектом Штарка переходов  $A_s$ , так и от амплитуд переходов с нарушением четности  $A_{pnc}$ . Полная скорость содержит интерференционный член:

$$W \propto |A_s|^2 + 2 \operatorname{Re} [A_s A_{pnc}^*] + |A_{pnc}|^2 \approx |A_s|^2 + 2 \operatorname{Re} [A_s A_{pnc}^*]. \quad (4.58)$$

Экспериментальный метод, при котором измеряется интерференционный член  $2 \operatorname{Re} [A_s A_{pnc}^*]$  для того чтобы определить  $A_{pnc}$ , известен под названием метода *штарковской интерференции*. Этот метод, с одной стороны, служит для того чтобы усилить сигнал НСЧ (который теперь пропорционален  $2 \operatorname{Re} [A_s A_{pnc}^*]$ , а не  $|A_{pnc}|^2$ ), а, с другой, представляет метод выделения сигнала НСЧ на фоне прочих сигналов (поскольку, например, сигнал НСЧ  $2 \operatorname{Re} [A_s A_{pnc}^*]$  инвертируется при изменении знака приложенного электрического поля).

(а) Показать, что амплитуда индуцированного эффектом Штарка перехода между состояниями одной четности  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$  может быть представлена в виде

$$A_s = T^{(0)} \cdot \langle m | U^{(0)} | n \rangle + T^{(1)} \cdot \langle m | U^{(1)} | n \rangle + T^{(2)} \cdot \langle m | U^{(2)} | n \rangle, \quad (4.59)$$

где  $T^{(\kappa)}$  — неприводимые части ранга  $\kappa$  приводимого тензора второго ранга, сформированного электрическим полем световой волны  $\vec{E}$  и статическим электрическим полем  $\vec{E}$ ,

$$T_{ij} = \mathbb{E}_i \mathcal{E}_j, \quad (4.60)$$

а  $U^{(\kappa)}$  — неприводимые части ранга  $\kappa$  соответствующего тензора, образованного из атомных векторов.

Как выглядит матричный элемент  $\langle m | U_{ij} | n \rangle$ ?

#### Решение

Индукцированные эффектом Штарка переходы происходят, когда статическое электрическое поле  $\vec{E}$  смешивает состояния  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$  с состояниями противоположной четности, а затем световое поле  $\vec{E}$  вызывает переходы между смешанными состояниями. Исходя из этой физической картины, мы можем записать амплитуды переходов в виде

$$A_s = \sum_p \left[ \frac{\langle m | \vec{d} \cdot \vec{E} | p \rangle}{E_m - E_p} \langle p | \vec{d} \cdot \vec{E} | n \rangle + \langle m | \vec{d} \cdot \vec{E} | p \rangle \frac{\langle p | \vec{d} \cdot \vec{E} | n \rangle}{E_n - E_p} \right], \quad (4.61)$$

где  $\vec{d}$  — оператор электрического дипольного момента, суммирование ведется по промежуточным состояниям  $|p\rangle$ , четность которых пропорциональна четности состояний  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$ ;  $E_n$ ,  $E_m$  и  $E_p$  — соответствующие невозмущенные энергии состояний  $|n\rangle$ ,  $|m\rangle$  и  $|p\rangle$ , а два члена в (4.61) соответствуют примешиванию состояний  $|p\rangle$  к конечному и начальному состояниям соответственно. Выражение (4.61) может быть представлено в следующем виде (где подразумевается суммирование по повторяющимся индексам  $i$ ,  $j$  и  $p$ ):

$$A_s = \frac{\langle m|d_i\mathbb{E}_i|p\rangle}{E_m - E_p} \langle p|d_j\mathcal{E}_j|n\rangle + \langle m|d_j\mathcal{E}_j|p\rangle \frac{\langle p|d_i\mathbb{E}_i|n\rangle}{E_n - E_p}. \quad (4.62)$$

Выделяя в виде сомножителей электрические поля (которые, очевидно, коммутируют с атомными волновыми функциями и операторами), мы можем написать

$$A_s = (\mathbb{E}_i\mathcal{E}_j) \left( \frac{\langle m|d_i|p\rangle\langle p|d_j|n\rangle}{E_m - E_p} + \frac{\langle m|d_j|p\rangle\langle p|d_i|n\rangle}{E_n - E_p} \right). \quad (4.63)$$

Таким образом, индуцированная эффектом Штарка амплитуда описывается сверткой тензора второго ранга  $T$  (где  $T_{ij} = \mathbb{E}_i\mathcal{E}_j$ ) с тензором второго ранга  $U$ :

$$\langle m|U_{ij}|n\rangle = \frac{\langle m|d_i|p\rangle\langle p|d_j|n\rangle}{E_m - E_p} + \frac{\langle m|d_j|p\rangle\langle p|d_i|n\rangle}{E_n - E_p}. \quad (4.64)$$

Свертка двух тензоров второго ранга может быть вычислена путем разложения каждого из тензоров на неприводимые компоненты (рангов 0, 1 и 2) с последующим суммированием скалярных произведений неприводимых компонент одного ранга  $\kappa$  (поскольку скалярное произведение может быть взято только между тензорами одного ранга, см. Приложение F). Таким образом скалярное произведение  $T$  и  $\langle m|U|n\rangle$  может быть представлено в виде (см., например, [Varshalovich и др. (1988)]):

$$A_s = T^{(0)} \cdot \langle m|U^{(0)}|n\rangle + T^{(1)} \cdot \langle m|U^{(1)}|n\rangle + T^{(2)} \cdot \langle m|U^{(2)}|n\rangle. \quad (4.65)$$

(6) Выписать в явном виде неприводимые тензоры ранга  $\kappa = 0, 1, 2$ , построенные из электрических полей в сферическом базисе.

### Подсказка

Общая процедура разложения приводимого тензора ранга  $\kappa$ , построенного из двух неприводимых тензоров рангов  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ , на неприводимые сферические тензоры состоит в следующем. Если мы имеем неприводимый тензор  $\mathbb{A}^{\kappa_1}$  ранга  $\kappa_1$  и неприводимый тензор  $\mathbb{B}^{\kappa_2}$  ранга  $\kappa_2$ , то можно образовать *неприводимое тензорное произведение* ранга  $\kappa$  [Varshalovich и др. (1988)]:

$$(\mathbb{A}^{\kappa_1} \otimes \mathbb{B}^{\kappa_2})_q^{\kappa} = \sum_{q_1, q_2} \langle \kappa_1, q_1, \kappa_2, q_2 | \kappa, q \rangle \mathbb{A}_{q_1}^{\kappa_1} \mathbb{B}_{q_2}^{\kappa_2}. \quad (4.66)$$

Мы можем также осуществить обратное разложение приводимого тензора  $\mathbb{A}_{q_1}^{\kappa_1} \mathbb{B}_{q_2}^{\kappa_2}$  ранга  $\kappa_1 + \kappa_2$  согласно выражению

$$\mathbb{A}_{q_1}^{\kappa_1} \mathbb{B}_{q_2}^{\kappa_2} = \sum_{\kappa=|\kappa_1-\kappa_2|}^{\kappa_1+\kappa_2} \langle \kappa_1, q_1, \kappa_2, q_2 | \kappa, q \rangle (\mathbb{A}^{\kappa_1} \otimes \mathbb{B}^{\kappa_2})_q^{\kappa}, \quad (4.67)$$

где  $q = q_1 + q_2$ .

Приводимый тензор второго ранга  $T$ , образованный из двух приводимых тензоров первого ранга  $\vec{\mathbb{E}}$  и  $\vec{\mathcal{E}}$ , может быть разложен на неприводимые тензоры  $T^{(k)}$  ранга  $\kappa = 0, 1, 2$ , компоненты которых даются выражением

$$T_q^\kappa = \sum_{q_1, q_2} \langle 1, q_1, 1, q_2 | \kappa, q \rangle \mathbb{E}_{q_1} \mathcal{E}_{q_2}. \quad (4.68)$$

### Решение

Можно ожидать, что часть приводимого тензора  $T$ , имеющая нулевой ранг, должна быть пропорциональна скалярному произведению  $\vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}}$ . Покажем формальным образом справедливость этого результата, используя математический метод, о котором говорилось в подсказке. Векторы электрического поля  $\mathbb{E}_i$  и  $\mathcal{E}_j$  являются неприводимыми тензорами первого ранга, которые могут быть представлены в сферическом базисе, согласно формулам (F.23)–(F.25), приведенным в Приложении F:

$$\mathbb{E}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{E}_x \pm i\mathbb{E}_y), \quad \mathbb{E}_0 = \mathbb{E}_z, \quad (4.69)$$

$$\mathcal{E}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{E}_x \pm i\mathcal{E}_y), \quad \mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_z. \quad (4.70)$$

В соответствии с выражением (4.66), неприводимое тензорное произведение нулевого ранга полей  $\vec{\mathbb{E}}$  и  $\vec{\mathcal{E}}$  имеет вид

$$\begin{aligned} (\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbb{E}_1^1 \mathcal{E}_{-1}^1 - \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbb{E}_0^1 \mathcal{E}_0^1 + \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbb{E}_{-1}^1 \mathcal{E}_1^1 = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbb{E}_x \mathcal{E}_x + \mathbb{E}_y \mathcal{E}_y + \mathbb{E}_z \mathcal{E}_z) = -\frac{1}{\sqrt{3}} \vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}}, \end{aligned} \quad (4.71)$$

отличающийся численным множителем от скалярного произведения этих векторов. Таким образом, для  $T_0^0$  мы получаем

$$T_0^0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}}. \quad (4.72)$$

Как мы знаем, единственным объектом ранга 1, который может быть образован из двух векторов, является векторное произведение, поэтому  $T_q^1 \propto (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}})_q$ . Это можно подтвердить формальным образом, проведя ту же процедуру, какую мы использовали выше, чтобы найти  $T_0^0$ :

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_1^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbb{E}_1^1 \mathcal{E}_0^1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbb{E}_0^1 \mathcal{E}_1^1 = \frac{1}{2} (\mathbb{E}_z \mathcal{E}_x - \mathbb{E}_x \mathcal{E}_z) + \frac{i}{2} (\mathbb{E}_z \mathcal{E}_y - \mathbb{E}_y \mathcal{E}_z), \quad (4.73)$$

и т. д. В выражении (4.73) мы воспользовались соотношениями (4.69), (4.50) и (4.66). В результате мы приходим к выражению

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_q^1 = \frac{i}{\sqrt{2}} (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}})_q, \quad (4.74)$$

и неприводимые тензорные компоненты ранга 1 даются формулой

$$T_q^1 = \frac{i}{\sqrt{2}} (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}})_q. \quad (4.75)$$



Для компонент второго ранга имеем

$$T_q^2 = (\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_q^2, \quad (4.76)$$

где, согласно (4.66)

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_2^2 = \mathbb{E}_1^1 \mathcal{E}_1^1, \quad (4.77)$$

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_1^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{E}_1^1 \mathcal{E}_0^1 + \mathbb{E}_0^1 \mathcal{E}_1^1), \quad (4.78)$$

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_0^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\mathbb{E}_1^1 \mathcal{E}_{-1}^1 + 2\mathbb{E}_0^1 \mathcal{E}_0^1 + \mathbb{E}_{-1}^1 \mathcal{E}_1^1), \quad (4.79)$$

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_{-1}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{E}_{-1}^1 \mathcal{E}_0^1 + \mathbb{E}_0^1 \mathcal{E}_{-1}^1), \quad (4.80)$$

$$(\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_{-2}^2 = \mathbb{E}_{-1}^1 \mathcal{E}_{-1}^1. \quad (4.81)$$

Тензоры  $U^{(\kappa)}$ , как и тензоры  $T^{(\kappa)}$  (формулы (4.72), (4.75), (4.76)), могут быть представлены в сферическом базисе. Амплитуда индуцированного эффектом Штарка перехода может быть теперь выражена через неприводимые сферические тензоры (пользуясь соотношениями (4.65) и (F.31) из Приложения F):

$$A_s = -\frac{1}{\sqrt{3}} (\vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}}) \langle m | U_0^0 | n \rangle + \sum_q \frac{i}{\sqrt{2}} (-1)^q (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}})_q \langle m | U_{-q}^1 | n \rangle + \\ + \sum_q (-1)^q (\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_q^2 \langle m | U_{-q}^2 | n \rangle. \quad (4.82)$$

**(в)** Используя теорему Вигнера–Эккарта (Приложение F), выразить амплитуду индуцированного эффектом Штарка перехода между состояниями  $|m, F', M'\rangle$  и  $|n, F, M\rangle$  через коэффициенты Клебша–Гордона.

### Решение

Из формулы (4.82) и теоремы Вигнера–Эккарта (F.1) находим амплитуду индуцированного эффектом Штарка перехода:

$$A_s = -\frac{1}{\sqrt{3}} (\vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}}) \frac{\langle m, F' | U_0^0 | n, F \rangle}{\sqrt{2F' + 1}} \langle F, M, 0, 0 | F', M' \rangle + \\ + \frac{i}{\sqrt{2}} (-1)^{M-M'} (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}})_{q=M-M'} \frac{\langle m, F' | U_1^1 | n, F \rangle}{\sqrt{2F' + 1}} \langle F, M, 1, M' - M | F', M' \rangle + \\ + (-1)^{M-M'} (\mathbb{E}^1 \otimes \mathcal{E}^1)_{q=M-M'}^{\kappa=2} \frac{\langle m, F' | U_2^2 | n, F \rangle}{\sqrt{2F' + 1}} \langle F, M, 2, M' - M | F', M' \rangle. \quad (4.83)$$

В литературе (см. например, [Bouchiat и Bouchiat (1975), Drell и Commins (1985), Bowers и др. (1999), Bennet и Wieman (1999)]) индуцированная эффектом Штарка амплитуда определяется через действительные параметры  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , известные как *скалярная*, *векторная* и *тензорная поляризуемости перехода* соответственно. Эти параметры отвечают трем членам в приведенном выражении. К сожалению, нет еди-

ного соглашения о нормировке этих параметров. В случаях, когда параметр  $\gamma$  равен нулю (см. п. (г)),  $\alpha$  характеризует индуцированную эффектом Штарка амплитуду при параллельной ориентации поля и поляризации света, в то время как  $\beta$  соответствует ортогональной ориентации электрического поля и направления поляризации света. В случае переходов между  $S_{1/2}$  состояниями (например для перехода  $6S_{1/2} \rightarrow 7S_{1/2}$  цезия, на котором ставились эксперименты по нарушению четности) амплитуда индуцированного эффектом Штарка перехода между состояниями с полным моментом  $F$  и  $F'$  дается выражением

$$A_s = \alpha \vec{\mathbb{E}} \cdot \vec{\mathcal{E}} \delta_{F,F'} \delta_{M,M'} + i\beta (\vec{\mathbb{E}} \times \vec{\mathcal{E}}) \langle F' M' | \vec{\sigma} | F M \rangle, \quad (4.84)$$

где  $\sigma$  — спиновый оператор Паули.

**(г)** Рассмотреть правила отбора по угловому моменту для переходов, описываемых рассмотренными поляризуемостями.

### Решение

Правила отбора по угловому моменту для различных членов в выражении (4.84) — это обычные правила для тензоров соответствующих рангов; см. табл. 4.1. Эти правила отбора следуют из свойств коэффициентов Клебша–Гордона.

Таблица 4.1

Различные вклады в поляризуемость переходов и соответствующие правила отбора по полному угловому моменту  $F$

	Ранг	Правила отбора
$\alpha$	0	$\Delta F = 0$
$\beta$	1	$\Delta F = 0, \pm 1; 0 \nrightarrow 0$
$\gamma$	2	$\Delta F = 0, \pm 1, \pm 2; 0 \nrightarrow 0; \frac{1}{2} \nrightarrow \frac{1}{2}; 0 \nrightarrow 1; 1 \nrightarrow 0$

В зависимости от типа перехода, в его амплитуду могут вносить вклад различные комбинации  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . Например, для перехода  $F = 1/2 \rightarrow F' = 1/2$  амплитуда индуцированного электрическим полем перехода имеет и скалярную и векторную компоненты [Bouchiat и Bouchiat (1975)], тогда как в амплитуду перехода  $F = 0 \rightarrow F' = 1$  вносит вклад только векторная компонента.

**(д)** Рассмотреть пределы приближений, использованных в вышеприведенном анализе.

### Решение

В этом разделе мы использовали теорию возмущений первого порядка, которая ограничивает применимость полученных результатов. В частности, полученные результаты справедливы только в случае, когда штарковские сдвиги актуальных состояний малы по сравнению с расстояниями между уровнями.

## 4.6. Магнитное отклонение света

Магнитооптические эффекты обычно проявляются в изменении параметров Стокса (Приложение D) светового поля, распространяющегося через среду, помещенную в магнитное поле (см. задачи 4.1, 4.3 и 4.7, а также обзор [Budker и др. (2002)]).

Здесь мы рассмотрим другой магнитооптический эффект, наблюдавшийся Шлессером и Вайсом [Schlesser и Weis (1992)] — отклонение светового пучка, распространяющегося через среду, помещенную в магнитное поле.

Рассмотрим изотропную среду, к которой приложено однородное магнитное поле  $\vec{B}$ .

(а) Напомним, что компоненты вектора индукции  $\vec{D}$  связаны с компонентами электрического поля  $\vec{E}$  соотношением

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j, \quad (4.85)$$

где  $\varepsilon_{ij}$  — тензор диэлектрической проницаемости. Исходя из соображений симметрии, доказать соотношение

$$\varepsilon_{ij}(\vec{B}) = \tilde{\varepsilon} \delta_{ij} + i \tilde{\gamma} \epsilon_{ijk} B_k, \quad (4.86)$$

где  $\tilde{\varepsilon}$  и  $\tilde{\gamma}$  — зависящие от частоты комплексные скалярные величины, а  $\epsilon_{ijk}$  — полностью антисимметричный тензор Леви-Чивита.

(б) Показать, что если линейно поляризованная волна с волновым вектором  $\vec{k}$  входит в такую среду перпендикулярно к ее границе, то вектор Пойнтинга

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{H} \quad (4.87)$$

внутри среды (т. е. направление потока энергии в световом пучке) имеет усредненную по времени величину вида

$$\langle \vec{S} \rangle \approx \frac{c E_0^2}{8\pi} [\hat{k} + \text{Im}(\tilde{\gamma}) \sin \varphi (\cos \varphi \vec{B} + \sin \varphi (\hat{k} \times \vec{B}))], \quad (4.88)$$

где  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  — электрическое и магнитное поле световой волны соответственно,  $\varphi$  — угол между поляризацией падающего света и магнитным полем  $\vec{B}$ , а  $\vec{B}$  лежит в

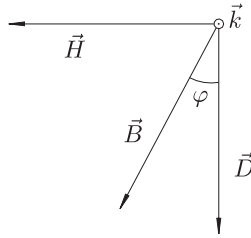


Рис. 4.8. Геометрическая связь между волновым вектором  $\vec{k}$ , вектором индукции  $\vec{D}$ , магнитным полем  $\vec{H}$  световой волны и статическим магнитным полем  $\vec{B}$ , приложенным к среде

плоскости, перпендикулярной  $\hat{k}$  (рис. 4.8). Будем считать среду немагнитной и слабопоглощающей:

$$\text{Im}(\tilde{\varepsilon}), |\text{Im}(\tilde{\gamma} B)| \ll \text{Re}(\tilde{\varepsilon}) \approx 1.$$

Величины  $E$  и  $H$  — модули оптического электрического поля и приложенного статического магнитного поля соответственно, а  $E_0$  — амплитуда оптического поля (т. е.  $E = E_0 \cos(\omega t)$ , где  $\omega$  — оптическая частота).

(в) Для наиболее благоприятной геометрии эксперимента оценить величину индуцированного магнитным полем отклонения лазерного луча при его прохождении через кювету длиной  $\ell$ , содержащую резонансные атомные пары (рис. 4.9).

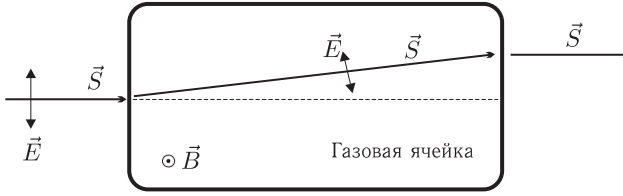


Рис. 4.9. Изменение направления вектора  $\vec{E}$  и, следовательно, вектора Пойнтинга  $\vec{S}$  внутри среды (например, атомной среды) приводит к отклонению светового пучка. Приведенная на рисунке геометрия оптимальна для наблюдения эффекта преломления и соответствует углу  $\varphi = \pi/2$  (см. текст)

### Подсказка

В п. (в) можно воспользоваться тем фактом, что компонента тензора диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{ij}$ , ответственная за магнитооптические явления, такие как индуцированные магнитным полем циркулярное двулучепреломление и дихроизм (задача 4.1), является также ответственной за магнитное отклонение. Поскольку комплексный показатель преломления связан с  $\varepsilon$  соотношением

$$n = \sqrt{\varepsilon}, \quad (4.89)$$

можно воспользоваться формулами из задачи 4.1 для определения величин индуцированных магнитным полем изменений показателя преломления.

### Решение

(а) Первый член в выражении (4.86) — обычная форма тензора диэлектрической проницаемости (см., например, [Griffiths (1999)] и книгу по электродинамике сплошных сред [Landau и др. (1995)]) для изотропных сред. В таких средах отсутствуют выделенные направления, и вектор индукции  $\vec{D}$  должен быть коллинеарен вектору  $\vec{E}$ :

$$\vec{D} = \tilde{\varepsilon} \vec{E}. \quad (4.90)$$

Когда к среде приложено магнитное поле, появляется другая возможность построения векторной величины из присутствующих в задаче векторов (или, точнее, из вектора электрического поля световой волны  $\vec{E}$  и псевдовектора  $\vec{B}$ ):  $\vec{B} \times \vec{E}$ . Это представлено вторым членом в (4.86). Множитель  $i$  приведен здесь явно, потому что величины  $\tilde{\varepsilon}$  и  $\tilde{\gamma}$  должны быть вещественными для прозрачной среды. Соотношение между  $\vec{D}$  и  $\vec{E}$  должно быть инвариантным по отношению к операции инверсии времени. Оба вектора  $\vec{D}$  и  $\vec{E}$  инвариантны по отношению к этой операции (Т-четные), а вектор  $\vec{B}$  является Т-нечетным. Поскольку операция инверсии времени подразумевает комплексное сопряжение всех операторов (см. задачу 1.13), множитель  $i$  обеспечивает требуемую время-инверсионную симметрию.

(6) Поскольку свет падает на среду нормально к ее поверхности, направление вектора  $\vec{k}$  при этом не меняется. Направление магнитного поля световой волны тоже не претерпевает изменений. Из уравнений Максвелла следует, что векторы  $\hat{k}$ ,  $\vec{D}$  и  $\vec{H}$  взаимно перпендикулярны. Следовательно, вектор индукции  $\vec{D}$  направлен вдоль электрического поля падающего света, т.е. вдоль  $\vec{k} \times \vec{H}$ . В общем случае, однако, электрическое поле в среде  $\vec{E}$  не коллинеарно вектору  $\vec{D}$ .

Из выражения (4.86) мы получаем

$$\vec{D} = \tilde{\varepsilon} \vec{E} - i\tilde{\gamma} \vec{B} \times \vec{E}. \quad (4.91)$$

Поскольку  $\vec{H} = \hat{k} \times \vec{E}$ , для нахождения вектора Пойнтинга нужно найти величину

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times (\hat{k} \times \vec{E}). \quad (4.92)$$

Применяя известное векторное тождество

$$\vec{E} \times (\hat{k} \times \vec{E}) = \hat{k}(E^2) - \vec{E}(\hat{k} \cdot \vec{E}), \quad (4.93)$$

мы имеем

$$\vec{S} = \frac{cE^2}{4\pi} \left[ \hat{k} - \vec{E} \frac{(\hat{k} \cdot \vec{E})}{E^2} \right]. \quad (4.94)$$

Сначала найдем  $\hat{k} \cdot \vec{E}$ , используя (4.91) и тот факт, что  $\hat{k} \cdot \vec{D} = 0$  (рис. 4.8):

$$\hat{k} \cdot \vec{E} = \frac{i\tilde{\gamma}}{\tilde{\varepsilon}} \hat{k} \cdot (\vec{B} \times \vec{E}) \approx \frac{i\tilde{\gamma}}{\tilde{\varepsilon}^2} \hat{k} \cdot (\vec{B} \times \vec{D}), \quad (4.95)$$

где мы пренебрегли членами  $\propto \tilde{\gamma}^2 B^2$ . Поскольку вектор  $\vec{B} \times \vec{D}$  направлен вдоль  $\hat{k}$  (рис. 4.8) и модуль вектора индукции  $D \approx \tilde{\varepsilon} E$ , мы получаем

$$\hat{k} \cdot \vec{E} \approx \frac{i\tilde{\gamma} B E}{\tilde{\varepsilon}} \sin \varphi. \quad (4.96)$$

Таким образом, для вектора Пойнтинга имеем

$$\vec{S} \approx \frac{cE^2}{4\pi} \left[ \hat{k} - i\tilde{\gamma} \left( \frac{B}{D} \right) \sin \varphi \vec{D} \right], \quad (4.97)$$

где мы опять пренебрегли членами  $\propto \tilde{\gamma}^2 B^2$ .

Поскольку  $\hat{k} \perp \vec{B}$ , мы получаем

$$\vec{D} = \vec{B} \frac{(\vec{D} \cdot \vec{B})}{B^2} + (\hat{k} \times \vec{B}) \frac{[\vec{D} \cdot (\hat{k} \times \vec{B})]}{B^2}. \quad (4.98)$$

Подставляя (4.98) в (4.97), мы получаем выражение (4.88)

$$\langle \vec{S} \rangle \approx \frac{cE_0^2}{8\pi} \left[ \hat{k} + \text{Im}(\tilde{\gamma}) \sin \varphi (\cos \varphi \vec{B} + \sin \varphi (\hat{k} \times \vec{B})) \right].$$

Здесь мы учли (взяв вещественную часть второго члена), что только компонента магнитного поля световой волны, находящаяся в фазе с электрическим полем, вносит вклад в среднее значение вектора Пойнтинга (4.87), а также использовали усредненную по времени величину  $\langle E^2 \rangle = E_0^2/2$ .

(в) Из выражения (4.88) следует, что максимальное отклонение наблюдается при  $\varphi = \pi/2$ .

Чтобы оценить величину смещения для пара в условиях, близких к резонансным, мы воспользуемся сделанным в подсказке предложением считать, что величина  $\delta n$  индуцированного магнитным полем изменения комплексного показателя преломления среды может быть подсчитана по формуле (см. задачу 4.1):

$$\delta n \sim \frac{g\mu B}{\Gamma} (n - 1). \quad (4.99)$$

Здесь  $g\mu B$  — зеемановский сдвиг,  $\Gamma$  — ширина перехода (например, доплеровская),  $n$  — не зависящий от магнитного поля комплексный показатель преломления, и магнитное поле считается слабым ( $|g\mu B| \ll \Gamma$ ).

В окрестности резонанса максимальные значения действительной и мнимой частей величины  $n - 1$  сопоставимы и могут быть оценены из выражения

$$4\pi \operatorname{Im}(n) \ell_0 / \lambda \sim 1, \quad (4.100)$$

где  $\ell_0$  — длина поглощения (задача 3.7), а  $\lambda$  — длина световой волны. Отсюда мы можем оценить величину соответствующего независящего от магнитного поля члена тензора диэлектрической проницаемости:

$$\operatorname{Im}(\tilde{\gamma}) B \sim \frac{1}{4\pi} \frac{g\mu B}{\Gamma} \frac{\lambda}{\ell_0}. \quad (4.101)$$

Из соотношений (4.101) и (4.88) мы находим, что при прохождении в среде расстояния  $\ell$ , световой пучок отклоняется на величину

$$\Delta \sim \frac{1}{4\pi} \frac{g\mu B}{\Gamma} \frac{\ell}{\ell_0} \lambda. \quad (4.102)$$

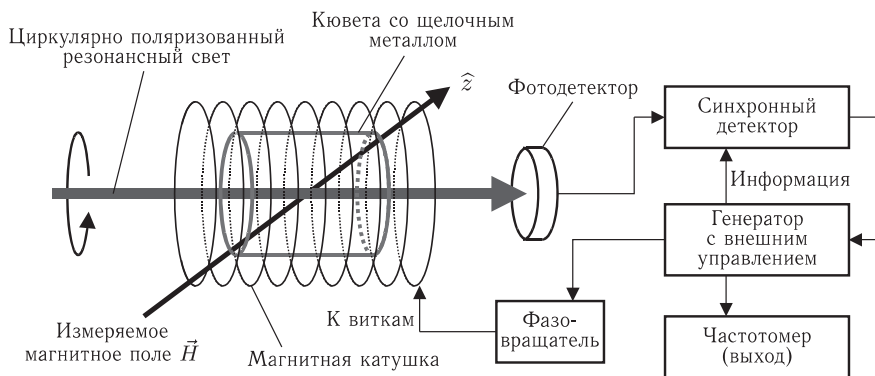
Заметим, что масштаб этого отклонения определяется длиной световой волны.

В работе [Schlessor и Weis (1992)] использовалась кювета с атомными парами рубидия при комнатной температуре с  $\ell/\ell_0 \sim 1$ . Свет был настроен на частоту линии D2 (852 нм), и к кювете было приложено магнитное поле 60 Гс, соответствующее  $g\mu B/\Gamma \sim 0,1$ . Наблюдаемое смещение пучка составило  $\sim 30$  нм.

## 4.7. Классическая модель магнитометра с оптической накачкой

На рис. 4.10 приведено схематическое изображение магнитометра с оптической накачкой в так называемой  $M_x$ -конфигурации (происхождение этого термина станет очевидным по ходу задачи).

Центральным элементом магнитометра является ячейка, содержащая пары одного из щелочных металлов (обычно Rb, Cs или K). Пары облучаются циркулярно поляризованным светом, резонансным D1 или D2 переходу. Прошедший свет регистрируется фотоприемником, подключенным к фазочувствительному (синхронному) детектору. Опорным сигналом синхронного детектора служит выходной сигнал генератора, который одновременно управляет током магнитных катушек, окружающих кювету с парами. Магнитное поле, создаваемой катушками, коллинеарно направлению распространения света. Частота генератора управляется медленно меняющимся напряжением, получаемым на выходе синхронного детектора.

Рис. 4.10. Упрощенная схема магнитометра с оптической накачкой  $M_x$ -типа

В этой задаче мы покажем, что при нужным образом выбранных условиях работы сигнал фотодетектора и высокочастотное магнитное поле осциллируют на ларморовой частоте, соответствующей полю  $H$ . Измеряя эту частоту (например, с помощью частотомера), можно определить величину  $H$ , используя известное значение гиромагнитного отношения<sup>1)</sup>.

Чтобы сделать модель магнитометра максимально простой, но одновременно сохранить его существенные свойства, мы сделаем несколько упрощающих допущений. Во-первых, вместо того чтобы рассматривать квантово-механическую задачу, включающую довольно сложную сверхтонкую структуру энергетических уровней щелочного атома, мы будем моделировать атомы «классическими» спинами с гиромагнитным отношением  $\gamma$ , таким, что спин, подвергнутый статическому магнитному полю  $\vec{H}$ , прецессирует вокруг направления магнитного поля с ларморовой частотой  $\gamma H$ . Компонента намагниченности вдоль  $\vec{H}$  релаксирует со скоростью  $\Gamma_1$  (*продольная релаксация*), а компоненты, перпендикулярные  $\vec{H}$ , релаксируют со скоростью  $\Gamma_2$  (*поперечная релаксация*)<sup>2)</sup>. Во-вторых, примем, что амплитуда радиочастотного магнитного поля мала по сравнению с  $H$ , и будем пренебрегать компонентой радиочастотного магнитного поля  $\vec{H}$ , направленной вдоль  $\hat{z}$ . Эта компонента приводит к быстрой модуляции ларморовой частоты, которая для нас, в данном случае, не важна. В-третьих, оставшуюся компоненту радиочастотного магнитного поля, которая осциллирует в направлении, перпендикулярном  $\hat{z}$ , можно разложить на две встречные вращающиеся компоненты, одна из которых вращается в том же

<sup>1)</sup> Для прецизионных измерений магнитного поля масштаба земного, где  $M_x$ -магнитометры находят широкое применение, следует учитывать нелинейность зеемановских энергетических сдвигов из-за смешивания различных сверхтонких компонент основного состояния щелочного атома под действием магнитного поля (задача 1.4).

<sup>2)</sup> Разница между поперечной и продольной релаксациями в ансамбле может возникнуть, когда отдельные спины, прецессирующие в магнитном поле, «видят» несколько различающихся магнитных полей (задача 2.8). В такой ситуации, если, например, спины первоначально ориентированы в одном и том же направлении под углом к магнитному полю, они в конце концов расплывутся из-за различия их скоростей прецессии, и поперечная намагниченность исчезнет, тогда как продольная намагниченность сохранится. Всегда справедливо неравенство  $\Gamma_2 \geq \Gamma_1$ .

направлении, что и магнитные моменты, а вторая — в противоположном. Поскольку мы будем рассматривать почти резонансные условия (т. е. когда радиочастота близка к ларморовой частоте прецессии), второй компонентой можно пренебречь (приближение вращающейся волны, см. задача 2.7).

Допустим, что скорость оптической накачки и скорости релаксации много ниже ларморовой частоты. Тогда, в отсутствие радиочастотного магнитного поля, существует стационарная намагниченность (мы обозначим ее  $M_0$ ), направленная вдоль оси  $\hat{z}$ . Действительно, поскольку оптическая накачка создает намагниченность вдоль  $\hat{z}$ , ларморова прецессия размывает векторы магнитных моментов, так что их концы равномерно распределяются по кругу в плоскости  $xy$ , и только  $\hat{z}$ -компонента «выживает» после усреднения по ансамблю атомов<sup>1)</sup>.

**(а)** Записать дифференциальные уравнения, описывающие классическую эволюцию декартовых компонент намагниченности с учетом влияния статического и вращающегося магнитных полей, а также продольной ( $\Gamma_1$ ) и поперечной ( $\Gamma_2$ ) релаксаций.

**(б)** Найти стационарное решение этих уравнений. Рассмотреть случаи  $\Gamma_1 = \Gamma_2$  и  $\Gamma_2 \gg \Gamma_1$ .

**(в)** Используя рис. 4.10, объяснить происхождение модуляции сигнала пропускания света. Какова цель фазовращателя?

### Подсказка

Удобно записать эти уравнения во *вращающейся системе координат*, т. е. в системе координат, в которой радиочастотное поле оказывается статическим. Сначала нужно записать уравнение без учета релаксации, а затем вписать релаксационные члены «от руки». Получаемые таким образом уравнения известны как *уравнения Блоха*, так как были впервые выведены в 1946 году одним из пионеров метода магнитного резонанса Феликсом Блохом.

### Решение

**(а)** Гиромангнитное отношение  $\gamma$  — это коэффициент пропорциональности между магнитным моментом атома  $\vec{M}$  и его угловым моментом  $\vec{F}$ :

$$\vec{M} = \gamma \vec{F}. \quad (4.103)$$

Производная по времени от углового момента, связанная с индуцированным магнитным полем моментом силы, имеет вид

$$\frac{d\vec{F}}{dt} = \vec{M} \times \vec{H}_t, \quad (4.104)$$

<sup>1)</sup> Никакой намагниченности не создается в специальном случае, когда  $\vec{H}$  перпендикулярно направлению распространения света. Это проявляется в возникновении «мертвой» зоны магнитометра. При этой ориентации прибор теряет чувствительность к внешнему магнитному полю. Другая мертвая зона такого типа в случае  $M_x$ -магнитометра возникает, когда магнитное поле  $\vec{H}$  направлено вдоль направления распространения света, и поле, создаваемое радиочастотной катушкой, становится чисто продольным.



где  $\vec{H}_t$  — полное магнитное поле (сумма статического и вращающегося), откуда (умножая обе части равенства (4.104) на  $\gamma$  и используя (4.103)) имеем

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}_t. \quad (4.105)$$

Затем, чтобы исключить явную временную зависимость магнитного поля, мы переходим в систему, вращающуюся вместе с радиочастотным полем на частоте  $\omega$ . Производные по времени от магнитного момента во вращающейся системе координат и в лабораторной системе координат связаны соотношением (см. задачу 2.6)

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{\text{rot}} = \left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{\text{lab}} - \vec{\omega} \times \vec{M} = \gamma \vec{M} \times \left(\vec{H}_t + \frac{\vec{\omega}}{\gamma}\right). \quad (4.106)$$

Мы проведем вычисления во вращающейся системе координат (координаты  $x'$ ,  $y'$ ,  $z$ ) и не будем использовать нижних индексов. Переписывая выражение (4.106) через декартовы компоненты, предполагая, что вращающееся поле направлено по оси  $\hat{x}'$ , и складывая релаксационные члены, мы получаем искомые уравнения Блоха:

$$\frac{dM_{x'}}{dt} = \gamma M_{y'} \left(H - \frac{\omega}{\gamma}\right) - \Gamma_2 M_{x'}, \quad (4.107)$$

$$\frac{dM_{y'}}{dt} = -\gamma M_{x'} \left(H - \frac{\omega}{\gamma}\right) + \gamma M_z H_r - \Gamma_2 M_{y'}, \quad (4.108)$$

$$\frac{dM_z}{dt} = -\gamma M_{y'} H_r - \Gamma_1 (M_z - M_0). \quad (4.109)$$

Здесь  $H_r$  — величина вращающегося поля, а  $M_0$  — равновесная намагниченность в отсутствие радиочастотного поля. Отметим, что мы выбрали направление вращения радиочастотного поля таким образом, что величина направленного по оси  $z$  магнитного поля во вращающейся системе координат уменьшается.

**(6)** Приравняв нулю производные левых частей уравнений (4.107), (4.108) и (4.109) (что можно сделать, поскольку во вращающейся системе координат задача является стационарной), мы получаем систему неоднородных линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} -\Gamma_2 & \Delta & 0 \\ -\Delta & -\Gamma_2 & \omega_r \\ 0 & -\omega_r & -\Gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{x'} \\ M_{y'} \\ M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Gamma_1 M_0 \end{pmatrix}. \quad (4.110)$$

Здесь  $\Delta = \gamma H - \omega$  и  $\omega_r = \gamma H_r$ . Решая эту систему относительно компонент намагниченности, получаем

$$M_{x'} = M_0 \frac{\omega_r \Delta}{\Gamma_2^2 + \Delta^2 + \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} \omega_r^2}, \quad (4.111)$$

$$M_{y'} = M_0 \frac{\omega_r \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2 + \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} \omega_r^2}, \quad (4.112)$$

$$M_z = M_0 \frac{\Delta^2 + \Gamma_2^2}{\Gamma_2^2 + \Delta^2 + \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} \omega_r^2}. \quad (4.113)$$

Для резонанса ( $\Delta = 0$ ) имеем:

$$M_{x'} = 0, \quad (4.114)$$

$$M_{y'} = M_0 \frac{\omega_r \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \frac{\Gamma_2^2}{\Gamma_1} \omega_r^2} = M_0 \frac{\omega_r \Gamma_1}{\Gamma_1 \Gamma_2 + \omega_r^2}, \quad (4.115)$$

$$M_z = M_0 \frac{\Gamma_2^2}{\Gamma_2^2 + \frac{\Gamma_2^2}{\Gamma_1} \omega_r^2} = M_0 \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 \Gamma_2 + \omega_r^2}, \quad (4.116)$$

т.е. во вращающейся системе координат средняя намагниченность располагается в плоскости  $y'z$  под углом

$$\text{tg}^{-1} \left( \frac{\omega_r}{\Gamma_2} \right) \quad (4.117)$$

к оси  $z$ . Величина  $M_{y'}$ -компоненты как функция  $\omega_r$  достигает своего максимума при  $\omega_r = \omega_r = \sqrt{\Gamma_1 \Gamma_2}$ . При  $\omega_r$ , равной этому значению, и при  $\Gamma_1 = \Gamma_2$   $M_{y'} = M_z$  и намагниченность направлена под углом  $\pi/4$  к оси  $z$ . При  $\Gamma_2 \gg \Gamma_1$  намагниченность составляет малый угол  $\sqrt{\Gamma_1/\Gamma_2}$  с осью  $z$ .

**(в)** Возвращаясь назад в лабораторную систему координат, мы видим, что стационарная (т.е. не зависящая от времени во вращающейся системе координат) намагниченность прецессирует вокруг оси  $z$  с частотой  $\omega$ . Эта прецессия приводит к временным изменениям (с частотой  $\omega$ ) проекции намагниченности на направление распространения света. Поскольку свет поляризован по кругу, коэффициент пропускания оказывается модулированным (см. задачу 3.9). Важно отметить, что компоненты модуляции, связанные с составляющими  $M_x$  и  $M_y$ , сдвинуты по фазе на  $\pi/2$ .

Выбором фазы между радиочастотным полем и опорным сигналом синхронного детектора (что осуществляется с помощью фазовращателя, показанного на рис. 4.10) выходной сигнал синхронного детектора может быть сделан чувствительным только к модуляции, обусловленной  $M_{x'}$ -компонентой, которая, согласно уравнению (4.111), является нечетной функцией расстройки  $\Delta$  между ларморовой частотой, соответствующей измеряемому полю  $H$ , и радиочастотой. Фаза выставляется таким образом, чтобы «привязать» частоту управляемого генератора к частоте ларморовой прецессии. Таким образом, магнитометр представляет собой автогенератор, частота которого определяется внешним магнитным полем.

## 4.8. Поиски постоянных электрических дипольных моментов (У)

Здесь мы исследуем возможность существования у атома *постоянного* электрического дипольного момента (ЭДМ). Мы покажем, что это возможно, например, при наличии ЭДМ у электрона. Длинная череда экспериментов была посвящена поиску ЭДМ различных частиц — прежде всего, нейтрона, а также электрона и ядер различных элементов. Имеется прекрасный обзор на эту тему [Khriplovich и Lamoreaux (1997)].

В этой задаче мы рассматриваем поиски ЭДМ электрона  $d_e$ . В настоящее время наиболее точный верхний предел для ЭДМ был получен в работе Комминза с сотрудниками, используя атомный таллий [Regan и др. (2002)]:

$$|d_e| \lesssim 1,5 \cdot 10^{-27} \text{ е} \cdot \text{см}. \quad (4.118)$$

(а) Может возникнуть вопрос, зачем нужно тратить столько усилий на поиски ЭДМ элементарных частиц, в то время как хорошо известно, что существует множество полярных молекул (вроде воды), имеющих «постоянные» дипольные моменты, а значения этих моментов могут быть найдены в стандартных справочниках! На самом деле полярные молекулы реально не обладают постоянным ЭДМ. В полярных молекулах уровни энергии противоположной четности расположены достаточно близко друг к другу по энергии, и их штарковское смешивание насыщается при довольно малых электрических полях, и молекулы полностью выстраиваются под действием локального электрического поля (см. задачу 7.6). В результате, они испытывают линейный штарковский сдвиг и ведут себя как имеющие постоянный дипольный момент.

Такое же поведение обнаруживают состояния  $2s$  и  $2p$  атома водорода, отделенные друг от друга только лэмбовским сдвигом. Рассчитать штарковский сдвиг этих уровней в зависимости от величины приложенного электрического поля  $\vec{E}$  и показать, что в пределе  $d_{sp}E \gg \omega_{sp}$  штарковский сдвиг зависит линейно от  $E$  (где  $d_{sp}$  — матричный элемент электрического диполя, а  $\omega_{sp} = 2\pi \cdot 1068 \text{ МГц}$  — расщепление  $2s-2p$ ). При каких значениях  $E$  штарковский сдвиг линеен по полю? (В этой части задачи пренебречь спином электрона.)

### Решение

Электрическое поле  $\vec{E}$ , приложенное к атому водорода вдоль оси  $\hat{z}$ , смешивает состояния  $2s$  и  $2p$ , и, вследствие правил отбора для электрических дипольных переходов (задача 2.1),  $\vec{E}$  смешивает только состояния с  $m = m'$ , например, состояния  $|2, 0, 0\rangle$  и  $|2, 1, 0\rangle$  (здесь мы обозначаем атомные состояния как  $|n, l, m\rangle$ ). Решая секулярное уравнение (см. задачу 1.4) для гамильтониана  $\mathbf{H}$ , описывающего эту систему ( $\hbar = 1$ ),

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \omega_{sp} & -d_{sp}E \\ -d_{sp}E & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.119)$$

мы получаем для собственных значений энергии

$$E_1 = \frac{\omega_{sp}}{2} \left( 1 - \sqrt{1 + 4 \frac{d_{sp}^2 E^2}{\omega_{sp}^2}} \right), \quad (4.120)$$

$$E_2 = \frac{\omega_{sp}}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + 4 \frac{d_{sp}^2 E^2}{\omega_{sp}^2}} \right). \quad (4.121)$$

Здесь мы пренебрегли релаксацией между уровнями. Для малых значений электрического поля ( $dE \ll \omega_{sp}$ ), мы получаем обычную квадратичную зависимость энергии от электрического поля:

$$E_1 \approx -\frac{d_{sp}^2 E^2}{\omega_{sp}}, \quad (4.122)$$

$$E_2 \approx \omega_{sp} + \frac{d_{sp}^2 E^2}{\omega_{sp}}, \quad (4.123)$$

а для больших полей ( $dE \gg \omega_{sp}$ ) мы находим

$$E_1 \approx -d_{sp} E, \quad (4.124)$$

$$E_2 \approx +d_{sp} E. \quad (4.125)$$

Действительно, в сильных электрических полях наблюдается линейный штарковский сдвиг, и атом ведет себя как будто он имеет постоянный дипольный момент  $d_{sp}$ . Но это происходит вследствие того, что два состояния теперь полностью смешаны внешним электрическим полем. До приложения внешнего поля атом не обладал собственным дипольным моментом.

Матричный элемент дипольного момента

$$d_{sp} = -e \langle 2, 1, 0 | z | 2, 0, 0 \rangle \quad (4.126)$$

вычислялся в задаче 4.4, где было показано, что (формула (4.49))

$$d_{sp} = -\sqrt{3} \, ea_0. \quad (4.127)$$

Поскольку  $ea_0 \approx 1,28$  МГц/(В/см) (Приложение А), линейный штарковский сдвиг наблюдается при

$$E \gg \frac{\omega_{sp}}{2d_{sp}} \approx 250 \text{ В/см}. \quad (4.128)$$

**(б)** Один из способов понять последствия существования ЭДМ атома  $\vec{d}_a$  состоит в том, чтобы рассмотреть гамильтониан

$$H_{\text{edm}} = -\vec{d}_a \cdot \vec{E}. \quad (4.129)$$

Показать, что существование такого дипольного момента нарушило бы инвариантность по четности (Р) и по инверсии времени (Т). (Какой вектор может определять направление  $\vec{d}_a$ ?)

Это нарушение симметрии является причиной большого интереса к ЭДМ. С макроскопической точки зрения представляется очевидным, что в природе присутствует стрела времени<sup>1)</sup>, но единственное свидетельство нарушения Т-инвариантности связано с наблюдением нарушения СР-инвариантности в нейтральных К- и В-мезонах (которое, согласно широко распространенному убеждению, что природа обладает комбинированной СРТ-симметрией, подразумевает нарушение Т-инвариантности).

<sup>1)</sup> Наиболее явное свидетельство существования «стрелы времени» являет второй закон термодинамики, который утверждает, что энтропия изолированной системы не может уменьшаться. Этот закон основан на том факте, что чем больше число микроскопических состояний (микросостояний), доступных для системы при заданном макроскопическом состоянии (макросостоянии), тем больше вероятность обнаружить систему в этом макросостоянии. Однако такая стрела времени не подразумевает законов физики, нарушающих Р-инвариантность, и не определяется ими. Следовательно, в принципе возможен переход системы из состояния с высокой энтропией в состояние с низкой энтропией. Просто для статистически больших систем это крайне маловероятно. Эти вопросы подробно рассмотрены в книге [Sachs (1987)].

Нарушение CP-симметрии включено в Стандартную Модель феноменологическим образом, и предсказания Стандартной Модели, касающиеся величины ЭДМ электрона, обусловленной этим нарушением CP-инвариантности, на много порядков величины уступают предельной чувствительности современной экспериментальной техники. Источник нарушения CP-инвариантности, в значительной степени, остается тайной, и различные попытки объяснения этого явления (как, например, с помощью суперсимметрии) часто предсказывают значения  $d_e$ , которые в настоящее время доступны для экспериментального измерения. Таким образом, поиски ЭДМ являются хорошим способом проверки новых теорий физики элементарных частиц.

### Решение

Рассмотрим гамильтониан, описывающий взаимодействие постоянного ЭДМ атома ( $\vec{d}_a$ ) с электрическим полем  $\vec{E}$ :

$$H_{\text{edm}} = -\vec{d}_a \cdot \vec{E}. \quad (4.130)$$

Согласно теореме Вигнера–Эккарта, среднее значение  $\vec{d}_a$  должно быть пропорциональным  $\langle \vec{F} \rangle$ , где  $\vec{F}$  — полный угловой момент атомного состояния (Приложение F). Следовательно, по теореме Вигнера–Эккарта  $\vec{d}_a$  должен быть аксиальным вектором, т.е. четным относительно преобразования инверсии. С другой стороны,  $\vec{E}$  — это полярный вектор, нечетный относительно P-преобразования. В результате  $H_{\text{edm}}$  оказывается P-нечетным, и, следовательно, нарушающим четность (см. задачу 1.13).

Аналогичным образом инверсия времени ( $\vec{F} \rightarrow -\vec{F}$ ) подразумевает  $\vec{d}_a \rightarrow -\vec{d}_a$ , в то время как вектор  $\vec{E}$  остается неизменным. Таким образом гамильтониан  $H_{\text{edm}}$  является нечетным по отношению к инверсии времени (T).

**(в)** Пусть электрон обладает постоянным ЭДМ  $d_e$ . Почему не представляются практичными попытки обнаружить ЭДМ у свободного электрона?

### Решение

Измерить ЭДМ свободного электрона трудно, поскольку электрон — заряженная частица. Мы ищем проявления взаимодействий  $d_e$  с электрическим полем, а приложенное электрическое поле будет придавать ускорение электрону, выводя его из исследуемой области и, таким образом, прекращая измерение.

Можно попытаться рассмотреть ловушку, способную локализовать электрон (типа ловушки Пеннинга, которую мы обсуждали в задаче 1.6), но, как мы увидим в п. (г), ЭДМ  $d_e$  станет наблюдаемым только вследствие наличия релятивистских эффектов<sup>1)</sup>. Значительно более практично пытаться обнаружить ЭДМ нейтрального атома, который (благодаря релятивистским эффектам) оказывается пропорциональным  $d_e$ .

**(г)** Из п. (в) видно, что наилучший способ поиска ЭДМ электрона состоит в измерении ЭДМ атома, поскольку атом нейтрален. Но создает ли ЭДМ электрона ЭДМ атома?

<sup>1)</sup> На самом деле вполне реалистично пытаться обнаружить ЭДМ мюона, используя релятивистские мюоны, захваченные магнитным накопительным кольцом (см., например, [Semertzidis и др. (2001)]). В принципе, аналогичный эксперимент может быть проведен для электрона, но он, скорее всего, не сможет достигнуть требуемой чувствительности по  $d_e$ , определяемой из атомных экспериментов.

Доказать, что согласно нерелятивистской квантовой механике, ЭДМ электрона не создает измеримого эффекта в атоме. Это — теорема, известная под названием теоремы Шиффа [Schiff (1963)].

### Решение

В нерелятивистском приближении атом можно рассматривать как идеальный проводник, в котором важными являются только электростатические силы. Во внешнем электрическом поле атом поляризуется таким образом, что внешнее поле внутри атома полностью компенсируется внутренним полем, создаваемым перестройкой окружающих ядро электронов. Это очевидным образом следует из того факта, что нейтральный атом под действием электрического поля не ускоряется и, следовательно, не ощущает действия силы. Следовательно, среднее значение электрического поля, действующего на каждую из частиц атома, должно быть равно нулю.

(д) К счастью оказывается, что, благодаря релятивистским эффектам, приложенное электрическое поле фактически оказывается «антиэкранированным». Другими словами, ЭДМ атома  $d_a$  оказывается в действительности усиленным по сравнению с ЭДМ электрона. Это явилось ключевым открытием Сандерса (1965), которое открыло путь огромному числу работ по поиску ЭДМ электрона с использованием парамагнитных атомов, содержащих неспаренные электроны.

Доказать, что

$$d_a \sim Z^3 \alpha^2 d_e \quad (4.131)$$

для основного состояния парамагнитного нейтрального атома с атомным номером  $Z$ .

Считать, что мы рассматриваем основное состояние некоторого тяжелого атома с одним валентным электроном, например, Cs. Можно воспользоваться тем фактом, что релятивистские эффекты выражены максимальным образом вблизи ядра в области  $r \lesssim a_0/Z$  (см. аналогичное обсуждение в задаче 1.13).

### Подсказка

Можно воспользоваться тем фактом, что ЭДМ электрона индуцирует атомный ЭДМ посредством смешивания состояний противоположной четности. Основной вклад в смешивание происходит вблизи ядра ( $r \lesssim a_0/Z$ ), где электрон является наиболее релятивистским.

### Решение

ЭДМ электрона  $d_e$  индуцирует ЭДМ атома  $d_a$  через смешивание состояний противоположной четности. Мы можем оценить отношение  $d_a/d_e$  с помощью следующего рассуждения.

Для измерения ЭДМ используется внешнее электрическое поле  $\vec{E}$  и измеряется энергетический сдвиг  $-\vec{d}_a \cdot \vec{E}$ . Иначе можно сказать, что энергетический сдвиг определяется величиной  $-\langle \vec{d}_e \cdot \vec{E}_{\text{ind}} \rangle$ , где  $\vec{E}_{\text{ind}}$  — индуцированное электрическое поле, которое «видит» электрон. Недавно, впрочем, было отмечено [Commins и др. (2007)] существование в этом вопросе некоторых нюансов и даже широко распространенных в литературе недоразумений. В [Commins и др. (2007)] отмечают, что даже в релятивистском случае  $\langle \vec{E}_{\text{ind}} \rangle = 0$ . Следовательно, в релятивистском случае отличным от нуля является только математическое ожидание произведения  $\langle \vec{d}_e \cdot \vec{E}_{\text{ind}} \rangle$ . Можно

грубо оценить величину  $\langle \vec{d}_e \cdot \vec{E}_{\text{ind}} \rangle$ , используя простые аргументы. Величина  $\vec{E}_{\text{ind}}$  в малом внешнем электрическом поле пропорциональна  $\vec{E}$  и испытывает насыщение при полной поляризации атома. Оценивая фактор усиления ЭДМ, рассмотрим величину  $\langle \vec{d}_e \cdot \vec{E}_{\text{ind}} \rangle \equiv d_e \vec{E}_{\text{eff}}$  для случая полной поляризации (где  $\vec{E}_{\text{eff}}$  — величина эффективного поля).

Из теоремы Шиффа (рассмотренной в п. (г)) мы знаем, что в нерелятивистском приближении  $E_{\text{eff}}$  равно нулю, поэтому  $E_{\text{eff}}$  должно возникать только за счет движения электрона. Поскольку среднее значение скорости электрона  $v$  равно нулю, члены первого порядка должны отсутствовать, и мы должны ожидать, что  $E_{\text{eff}} \sim (v^2/c^2)E_{\text{int}}$ , где  $E_{\text{int}}$  — внутреннее электрическое поле атома. В области  $r \lesssim a_0/Z$ , где релятивистские эффекты выражены максимальным образом,  $v \sim Z\alpha c$  и электрическое поле, обусловленное незаэкранированным ядром, равно

$$E_{\text{int}} \sim \frac{Z^3 e}{a_0^2}. \quad (4.132)$$

Таким образом, мы имеем

$$d_e E_{\text{eff}} \sim d_e Z^5 \alpha^2 \frac{e}{a_0^2} \quad (4.133)$$

при  $r \lesssim a_0/Z$ . Как эта величина соотносится с энергетическим сдвигом  $\vec{d}_a \vec{E} \sim d_a E$  для полностью поляризованного атома? Полагая, что атом полностью поляризован, мы приходим к оценке

$$d_a E \sim d_a \frac{e}{a_0^2} \quad (4.134)$$

для атома с единственным валентным электроном. Приравнявая  $d_a E$  из уравнения (4.134) нашей оценке величины  $d_e E_{\text{eff}}$  из формулы (4.133), получаем

$$\boxed{d_a \sim Z^3 \alpha^2 d_e}. \quad (4.135)$$

Отношение  $d_a/d_e$  известно как фактор усиления ЭДМ и, очевидно, для тяжелых атомов может значительно превышать единицу. Этот фактор усиления является важным понятием для режима слабого поля (когда электрическое поле не достаточно для полной поляризации атома, и энергетический сдвиг, индуцируемый ЭДМ, пропорционален величине  $d_a E$ ). Однако, как отмечалось выше, если поле достаточно велико для насыщения атомной поляризации, энергетический сдвиг перестает зависеть от  $E$ . Этот режим полной поляризации легко достигается для атомов и молекул с почти вырожденными уровнями противоположной четности (как отмечалось в п. (а) этой задачи).

**(е) И**, наконец, мы проанализируем модельный эксперимент по измерению ЭДМ, используя метод разнесенных осциллирующих полей [Ramsey (1985)]. Это — основная техника, используемая в ЭДМ экспериментах <sup>1)</sup>, а также в некоторых конструкциях атомных часов. Основное преимущество такой схемы состоит в том, что она

<sup>1)</sup> Например, Парселл и Рамсей (1950) впервые предложили осуществлять поиск ЭДМ нейтрона с помощью разнесенных осциллирующих полей и, действительно, провели эксперимент [Smith и др. (1957)]. Этот метод также используется в настоящее время для получения максимальной чувствительности по ЭДМ электрона [Regan и др. (2002)].

позволяет значительно снизить пролетное уширение линии (задача 3.13) и, как следствие, увеличить точность измерения частоты осцилляций атомной поляризации<sup>1)</sup>.

Рассмотрим экспериментальную установку, показанную на рис. 4.11. Исследуемый объем помещен во внешнее статическое магнитное поле  $\vec{B}$ , а в центре установки расположены две пластинки, создающие электрическое поле  $\vec{E}$ , направленное параллельно полю  $\vec{B}$ . Эти поля определяют направление оси квантования ( $z$ ).

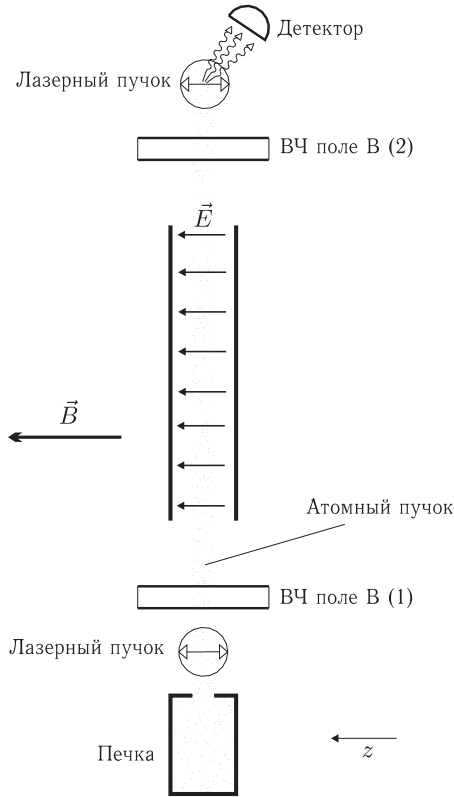


Рис. 4.11. Схема установки по поиску ЭДМ с помощью метода разнесенных осциллирующих полей Рамсея (подробности в тексте). Лазерные пучки распространяются перпендикулярно плоскости рисунка и линейно поляризованы вдоль  $z$

После истечения из испарителя атомы проходят через лазерный пучок, который оптически перекачивает их на определенный зеемановский подуровень. Пусть основное состояние атомов характеризуется полным угловым моментом  $F = 1$ , а лазерное излучение настроено на E1-переход  $F = 1 \rightarrow F' = 1$ .

<sup>1)</sup> Вместо разнесенных полей можно представить себе использование традиционной техники Раби (см., например, дискуссию в книге [Ramsey (1985)]) с большим объемом взаимодействия — сопоставимым по величине с расстоянием между областями радиочастотного возбуждения в методе Рамсея. Этот подход неудобен по техническим причинам из-за трудностей обеспечить высокую однородность радиочастотного поля по большому объему среды и избежать уширения резонанса из-за градиентов постоянного поля.



Считая, что соответствующий параметр насыщения  $\kappa \gg 1$ , найти состояние атомов после выхода из области взаимодействия с лазерным пучком. (Лазерный пучок линейно поляризован вдоль оси  $z$ , как показано двойной стрелкой на рис. 4.11).

После взаимодействия с первым лазерным пучком атомы попадают в область, к которой приложено радиочастотное магнитное поле (перпендикулярное плоскости рисунка), осциллирующее на ларморовой частоте  $g_F \mu_0 B$ . Величина радиочастотного поля выбрана таким образом, что направление атомной поляризации поворачивается на угол  $\pi/2$  (на этом этапе используется метод магнитного резонанса, см. задачу 2.6). Каково состояние атомов (в спинорном представлении) после того, как они покидают первую область радиочастотного возбуждения?

Затем атомы проходят через область действия электрического поля, где поле  $\vec{E}$  сдвигает энергию состояния  $M_F = 0$  по отношению к энергии состояний  $M_F = \pm 1$  вследствие обычного квадратичного эффекта Штарка (см., например, задачу 2.1). Состояния  $M_F = \pm 1$  расщеплены вследствие действия магнитного поля. Если атом обладает ЭДМ, то существует определенный малый вклад от  $d_a$  в расщепление состояний  $M_F = \pm 1$ .

После выхода из области действия электрического поля атомы проходят через второй участок радиочастотного воздействия, идентичный первому, за исключением того, что фаза второго радиочастотного поля может быть смещена на некоторый угол  $\phi$  относительно фазы первой области радиочастотного возбуждения. Детектируемым сигналом служит флуоресценция атомов, возбуждаемых во второй области взаимодействия с лазерным пучком. Второй пучок также резонансен переходу  $F = 1 \rightarrow F' = 1$  и линейно поляризован вдоль оси  $z$ .

Показать, что при соответствующем выборе угла  $\phi$  сигнал флуоресценции линеен по  $d_a$ . Принять, что при  $\phi = 0$  и  $E = 0$  вторая область радиочастотного возбуждения возвращает атомы в состояние, в которое они были перекачены в первой области взаимодействия с лазерным пучком.

Отметим, что такая базовая схема обладает одним серьезным недостатком. Атомы, движущиеся через электрическое поле, видят вызванное движением магнитное поле (задача 2.9)

$$\vec{B}_{\text{mot}} = \vec{E} \times \frac{\vec{v}}{c}, \quad (4.136)$$

которое взаимодействует с магнитным моментом атомов и вызывает дополнительную прецессию, линейно связанную с  $\vec{E}$ . На практике этот эффект можно отличить от сигнала ЭДМ, например, используя два встречных пучка атомов (поскольку этот эффект, в отличие от сигнала ЭДМ, *меняет* знак при инверсии  $\vec{v}$ ). Кроме этого эффекта  $\vec{E} \times \vec{v}$  существует множество других слабых эффектов (типа геометрических фаз (задача 2.12), токов утечки и пр.), которые должны учитываться и контролироваться.

### Решение

В первой области взаимодействия с лазерным пучком атомы оптически перекачиваются на подуровень  $M_F = 0$  (оптическая накачка  $F \rightarrow F'$  переходов рассматривается в задаче 3.9). Поскольку  $\kappa \gg 1$ , мы можем принять, что атомы полностью

перекачены в состояние, которое в спинорном представлении имеет вид (рис. 4.12)

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.137)$$

Заметим, что по отношению к лазерному возбуждению состояние  $|\psi_1\rangle$  является темным состоянием (см. задачу 3.9). Кроме того, поскольку направление поляризации совпадает с направлением  $\vec{B}$ , магнитное поле не оказывает на это состояние никакого влияния.

Радиочастотное магнитное поле в первой области радиочастотного возбуждения поворачивает атомное состояние на  $\pi/2$  вокруг оси  $y$ . Используя соответствующую матрицу вращения  $\mathcal{D}(0, \pi/2, 0)$ , мы получаем для этого преобразования (Приложение Е)

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (4.138)$$

Условие такого поворота легко формулируется в системе координат, вращающейся с ларморовой частотой  $\Omega_L = g_F \mu_0 B$  (задача 2.6). Линейно поляризованное радиочастотное поле  $B_{\text{rf}}$  может быть представлено в виде двух циркулярно поляризованных полей. Во вращающейся системе координат, в условиях резонанса, одна циркулярная

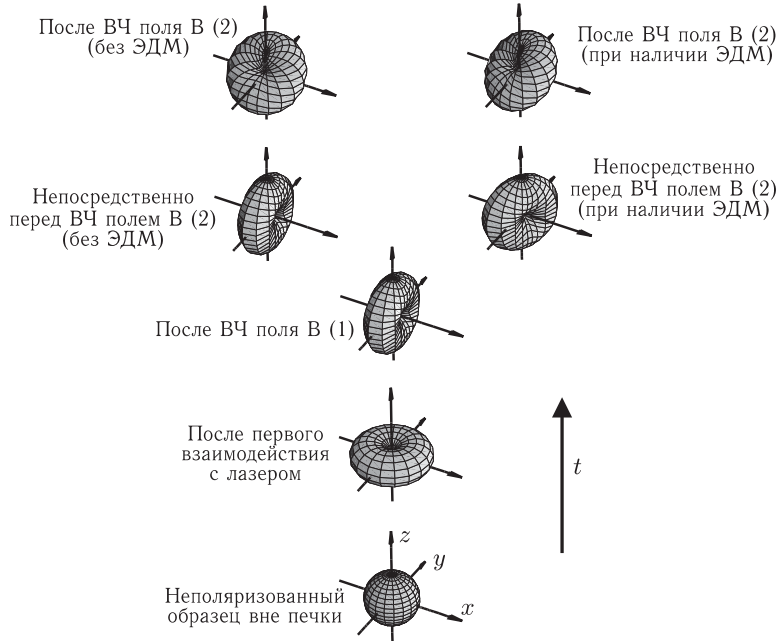


Рис. 4.12. Индикатрисы вероятности (расстояние от начала координат пропорционально вероятности обнаружения проекции  $M = F$  в этом направлении, см. задачу 9.7), описывающие атомную поляризацию на различных этапах модельного ЭДМ эксперимента, описанного в тексте (см. также рис. 4.11)

компонента превращается в статическое магнитное поле величиной  $B_{\text{rf}}/2$ , тогда как вторая вращается со скоростью  $2\Omega_L$ . Пользуясь приближением вращающейся волны (задача 2.7), мы пренебрегаем быстро вращающейся компонентой. Атомная поляризация прецессирует вокруг статического поперечного поля с частотой  $g_F\mu_0 B_{\text{rf}}$ , и если атомы характеризуются средним временем пролета  $\tau$ , то величина радиочастотного поля настраивается таким образом, что

$$g\mu_0 B_{\text{rf}} \tau = \pi, \quad (4.139)$$

чтобы обеспечить нужный поворот.

Теперь ось атомной поляризации направлена вдоль  $\vec{B}$ , и поляризация прецессирует на ларморовой частоте  $\Omega_L$ :

$$|\psi_3(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega_L t} \\ 0 \\ -e^{i\Omega_L t} \end{pmatrix}. \quad (4.140)$$

Если атом обладает ЭДМ, то между состояниями появляется дополнительный фазовый сдвиг:

$$|\psi_3(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\Omega_L + d_a E)t} \\ 0 \\ -e^{i(\Omega_L + d_a E)t} \end{pmatrix}. \quad (4.141)$$

Если мы опять переходим в систему координат, вращающуюся с частотой  $\Omega_L$ , мы имеем

$$|\psi_3^{(\text{rot})}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-id_a E t} \\ 0 \\ -e^{id_a E t} \end{pmatrix}. \quad (4.142)$$

И, наконец, атомы входят во вторую область радиочастотного воздействия. Радиочастотное поле в этой области сдвинуто по фазе на угол  $\phi$  по отношению к первому радиочастотному полю. Таким образом, во вращающейся системе координат с осью квантования, направленной вдоль радиочастотного поля, во второй области радиочастотного возбуждения состояние атома на входе имеет вид

$$|\psi_4^{(\text{rot})}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(d_a E t + \phi)} \\ 0 \\ -e^{i(d_a E t + \phi)} \end{pmatrix}. \quad (4.143)$$

Радиочастотное поле преобразует атомную поляризацию согласно выражениям

$$|\psi'_4\rangle = \mathcal{D}(0, \pi/2, 0) |\psi_4^{(\text{rot})}(t)\rangle = \quad (4.144)$$

$$= \begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(d_a E t + \phi)} \\ 0 \\ -e^{i(d_a E t + \phi)} \end{pmatrix} = \quad (4.145)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \sin(d_a E t + \phi) \\ -\cos(d_a E t + \phi) \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin(d_a E t + \phi) \end{pmatrix}. \quad (4.146)$$

Когда атомы входят во вторую область взаимодействия с лазерным пучком, сигнал флуоресценции  $\mathcal{F}$  пропорционален населенности состояний  $M_F = \pm 1$ :

$$\mathcal{F} \propto \sin^2(d_a Et + \phi) = \frac{1}{2}[1 - \cos(2d_a Et + 2\phi)]. \quad (4.147)$$

Если мы выберем  $\phi = \pi/4$ , мы получаем (разумеется, в предположении, что  $d_a Et \ll \ll 1$ ):

$$\boxed{\mathcal{F} \propto \frac{1}{2} + d_a Et.} \quad (4.148)$$

Заметим, что если направление электрического поля по отношению к магнитному полю инвертировать, то мы получим

$$\mathcal{F} \propto \frac{1}{2} - d_a Et. \quad (4.149)$$

Наличие достоверной разности сигналов, описываемых формулами (4.148) и (4.149), служит признаком и мерой существования ЭДМ.

## Глава 5

# АТОМНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

### 5.1. Столкновения в буферном газе

Пусть мы имеем объем, содержащий газ молекул с плотностью  $n$  и сечением столкновений  $\sigma$ .

Какова средняя длина свободного пробега молекулы и среднее время между столкновениями?

Допустим теперь, что мы добавляем в объем какой-то иной газ (буферный газ). Как это повлияет на частоту столкновений молекул основного газа между собой <sup>1)</sup>?

#### Решение

Средняя длина свободного пробега  $\lambda$  молекулы между столкновениями дается выражением

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma}, \quad (5.1)$$

где  $n$  — плотность, а  $\sigma$  — сечение рассеяния при столкновении. Характерное время между столкновениями составляет  $\sim \lambda/\bar{v}$ , где  $\bar{v}$  — средняя относительная тепловая скорость.

Если буферный газ с плотностью  $n'$  и столкновительным сечением  $\sigma'$  (для столкновений с основными молекулами) добавляется в систему, полная частота столкновений  $\gamma$  для основных молекул дается выражением

$$\gamma = n\sigma\bar{v} + n'\sigma'\bar{v}' = \gamma_{\text{self}} + \gamma_{\text{buffer}}, \quad (5.2)$$

где  $\bar{v}'$  — средняя скорость относительного движения основных молекул и молекул буферного газа, а  $\gamma_{\text{self}}$  и  $\gamma_{\text{buffer}}$  — частоты самостолкновений и столкновений с молекулами буферного газа. Заметим, что частота столкновений между основными молекулами, фактически, *не меняется*, просто возрастает полное число столкновений! Таким образом, введение буферного газа не меняет время между столкновениями основных молекул друг с другом.

Этот результат иллюстрируется рис. 5.1: молекула,двигающаяся по кювете, захватывает эффективный объем  $V_{\text{eff}} = \sigma\bar{v}t$  и вероятность столкновения становится близкой к единице, когда  $V_{\text{eff}} = 1/n$ . Эти параметры не зависят от частоты столкновений с молекулами буферного газа. Заметим, что этот результат справедлив только для равновесных условий, например, в предположении, что газы хорошо перемешаны.

---

<sup>1)</sup> Постановка этой задачи была инициирована В. В. Яшуком.

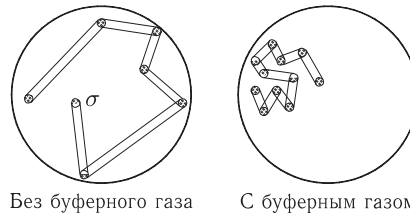


Рис. 5.1. Молекула, движущаяся по «вакуумной» кювете и в кювете с буферным газом. Хотя общее число столкновений при наличии буферного газа возрастает, эффективный объем, захватываемый молекулой за заданный промежуток времени  $t$ , не меняется

## 5.2. Уширение спектральных линий, обусловленное диффузией фазы

Здесь мы рассмотрим уширение спектральных линий в случае, когда излучающие атомы исследуемой системы испытывают последовательность случайных фазовых сдвигов. Такие фазовые сдвиги могут быть вызваны, например, столкновениями с другими атомами (уширение давлением) или столкновениями со стенками кюветы с антирелаксационными покрытиями. Родственным эффектом является фазовая диффузия лазерного излучения, происходящая вследствие спонтанного или теплового испускания в лазерную моду. Это явление накладывает фундаментальное ограничение на ширину линии лазерного излучения (так называемый *предел Шавлова–Таунса*; см., например, [Yariv (1989)]).

(а) Рассмотрим ансамбль идентичных дипольных излучателей с частотой  $\omega_0$ , сфазированных в момент времени  $t = 0$ , каждый из которых постоянно осциллирует при  $t > 0$ . Допустим, однако, что осцилляторы получают малые случайные «толчки», так что их фазы по отношению к невозмущенному осциллятору испытывают случайные блуждания (размер скачка фазы  $\phi_1 \ll 1$ , и скачки происходят через интервалы времени  $t_c$ ). Пусть скачок фазы с равной вероятностью может быть как положительным, так и отрицательным. Каков спектр излучения такого ансамбля?

(б) Рассмотрим теперь несколько более сложную задачу.

Во-первых, учтем статистическое распределение числа толчков  $n$ , которое испытывают атомы за промежуток времени  $t$ , которое мы примем пуассоновым:

$$p(n, t) = \frac{e^{-t/t_c} (t/t_c)^n}{n!}, \quad (5.3)$$

где  $p(n, t)$  — вероятность того, что атом испытает  $n$  столкновений за время  $t$  (среднее число толчков, соответствующее распределению (5.3),  $\langle n \rangle = t/t_c$ ).

Во-вторых, предположим, что фазовый сдвиг при каждом толчке не один и тот же. Мы примем нормальное (гауссово) распределение со средним значением  $\phi$  ( $|\phi| \ll 1$ ) и с дисперсией  $\phi^2$ <sup>1)</sup>.

Найти сдвиг и уширение спектра излучения в этом случае.

<sup>1)</sup> Последнее свойство справедливо, например, когда фазовые сдвиги связаны со столкновениями с антирелаксационным покрытием стенок кюветы. Это следует из распределения времен залипания молекул на стенках при универсальной энергии связи превышающей  $k_B T$  (см., например, [Goldenberg и др. (1961)]).

### Решение

**(а)** В результате случайного блуждания на промежутке времени  $t$  фазы осцилляторов окажутся распределенными по гауссовому закону

$$P(\phi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \phi_0} e^{-\frac{\phi^2}{2\phi_0^2(t)}}, \quad (5.4)$$

где ширина гауссиана

$$\phi_0(t) = \phi_1 \sqrt{t/t_c}. \quad (5.5)$$

Действительно, при случайном блуждании ширина гауссова распределения равна произведению величины скачка на корень квадратный из числа скачков (см., например, [Reif (1965)]).

Амплитуда излучения, испускаемого ансамблем в момент времени  $t$ , определяется суммой амплитуд всех осцилляторов, которая пропорциональна величине

$$A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\phi, t) e^{i(\omega_0 t + \phi)} d\phi = e^{-\frac{\phi_1^2 t}{2t_c} + i\omega_0 t}. \quad (5.6)$$

Осуществляя преобразование Фурье этой амплитуды и затем возводя в квадрат модули полученных величин, мы находим, что спектральное распределение интенсивности излучения описывается лоренцевой функцией

$$I(\omega) \propto \frac{\gamma^2/4}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2/4}, \quad (5.7)$$

где полная ширина на полувысоте (ПШПВ) дается выражением

$$\gamma = \frac{\phi_1^2}{t_c}. \quad (5.8)$$

Этот пример иллюстрирует общий вывод о том, что ширина линии определяется обратным временем потери когерентности системой<sup>1)</sup>: чтобы приобрести фазовый сдвиг  $\sim 1$  осциллятору потребуется  $1/\phi_1^2$  скачков, для чего нужно затратить время  $t_c/\phi_1^2$ .

**(б)** Рассмотрим атомы, которые испытали некоторое фиксированное число толчков  $n \gg 1$ . Пусть  $\phi_n$  — это полная фаза, накопленная атомом за  $n$  толчков. Ввиду нормального закона распределения фазовых сдвигов по отдельным толчкам (при-

<sup>1)</sup> Например, этот подход дает нам простой способ определить доплеровскую ширину. Допустим, что мы имеем два атома, излучающие свет с частотой  $\omega_0$  (в их системе координат), но они имеют относительную скорость  $v$  (в направлении наблюдения). По мере того как расстояние между атомами меняется, меняется также и разность фаз между полями излучения двух атомов:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi\Delta x}{\lambda} \approx \frac{2\pi vt}{\lambda},$$

и когда  $\Delta\phi \sim 1$ , мы получаем

$$\Gamma_D = \frac{1}{t} \approx \frac{2\pi v}{\lambda}.$$

водящего к случайному блужданию фаз), мы приходим к гауссову распределению накопленных фаз:

$$p(\phi_n, n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n\phi^2}} e^{-\frac{(\phi_n - n\phi)^2}{2n\phi^2}}, \quad (5.9)$$

где  $n\phi$  — средняя фаза, накопленная за  $n$  толчков, а  $n\phi^2$  — ее дисперсия.

Принимая во внимание распределения (5.3) и (5.9), амплитуда осцилляций, усредненная по ансамблю атомов, находится как сумма вкладов (с весами) от отдельных атомов ( $\propto e^{i(\omega_0 t + \phi_i)}$ ), где  $\phi_i$  — фаза, накопленная данным атомом):

$$A(t) \propto \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-t/t_c} (t/t_c)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\omega_0 t + \phi_n)}}{\sqrt{2\pi n\phi^2}} e^{-\frac{(\phi_n - n\phi)^2}{2n\phi^2}} d\phi_n = \quad (5.10)$$

$$= e^{i\omega_0 t - t/t_c} (1 - e^{-i\phi - \phi^2/2}), \quad (5.11)$$

где на последнем шаге мы проводим явные вычисления интеграла и суммы. Затем мы используем тот факт, что  $|\phi| \ll 1$  и, разлагая экспоненциальный множитель по  $\phi$  вплоть до членов второго порядка, получаем

$$A(t) \propto e^{i(\omega_0 - \phi/t_c)t - \phi^2 t/t_c}. \quad (5.12)$$

Это выражение показывает, что частота осцилляций смещена на  $-\phi/t_c$ , а амплитуда осцилляций затухает со скоростью  $\phi^2/t_c$ , что приводит к уширению линии.

Преобразуя полученную амплитуду по Фурье, мы опять получаем выражение для спектрального распределения:

$$I(\omega) \propto \frac{\gamma^2/4}{(\omega - \omega_0 + \phi/t_c)^2 + \gamma^2/4}. \quad (5.13)$$

В этом случае, однако,

$$\gamma = \frac{2\phi^2}{t_c}. \quad (5.14)$$

Интересно заметить, что пренебрежение одним из случайных факторов — разбросом числа столкновений, испытываемых атомом в единицу времени, или разбросом фазового сдвига на одно столкновение — приводит к скорости затухания в два раза более низкой.

### 5.3. Сужение Дике

Для движущегося атома резонансная частота перехода  $\omega_0$  смещается вследствие эффекта Доплера:

$$\Delta\omega = \omega_0 \left(1 - \frac{v}{c}\right), \quad (5.15)$$

где  $v$  — проекция скорости на направление распространения света. Для ансамбля атомов с различными скоростями это приводит к доплеровскому уширению спектральных линий. Представим себе, однако, что атом часто меняет направление своего



движения (например, из-за столкновений с другими атомами) без изменений своего внутреннего состояния. В этом случае среднее значение  $v$  оказывается равным нулю, и доплеровское уширение должно отсутствовать. Следовательно, мы можем говорить о двух качественно различающихся режимах уширения в зависимости от того, как часто происходят события, приводящие к изменению скорости атома [Dicke (1953)].

Для атомных и молекулярных переходов, лежащих в ИК и микроволновой области спектра, столкновительное подавление доплеровского вклада в ширину линии (сужение Дике) наблюдается легко. На рис. 5.2 приведены экспериментальные данные, демонстрирующие сужение Дике для перехода в микроволновой области спектра<sup>1)</sup>. Частота микроволнового перехода (для свободных атомов  $^{85}\text{Rb}$ ) равна 3 035 732 440 Гц, и, следовательно, длина волны микроволнового перехода ( $\sim 10$  см) сопоставима с размерами ячейки. Это соответствует промежуточному режиму между обычным доплеровским уширением и его полным подавлением вследствие эффекта Дике. В результате наблюдается наложение узкого бездоплеровского пика на доплеровски уширенную линию (шириной  $\sim 4$  кГц).

В этой задаче мы рассмотрим сужение Дике и сделаем некоторые оценки, чтобы понять, можно ли его наблюдать на оптических переходах, когда скачки скоростей являются следствием столкновений с атомами буферного газа.

**(а)** Привести классические и/или квантово-механические аргументы, показывающие, что переход между двумя режимами уширения происходит, когда средняя длина свободного пробега между двумя столкновениями, приводящими к изменениям скорости, удовлетворяет условию  $L \sim \lambda$ , где  $\lambda = 2\pi c/\omega_0$  — длина волны излучения. Получить выражение для остаточной доплеровской ширины при условии, что  $L \ll \lambda$ .

**(б)** Для типичного оптического перехода и атомов с тепловыми скоростями оценить давление газа (в торрах), необходимое для достижения этого условия, при скачках скорости, вызываемых столкновениями с атомами буферного газа. Использовать типичные значения температуры ( $T \sim 1000$  К) и сечения меняющих скорость столкновений ( $\sigma_{\text{вс}} \sim 10^{-15}$  см<sup>2</sup>).

**(в)** Условие, что внутреннее состояние атома не меняется при столкновении, существенно ограничивает число ситуаций, когда может наблюдаться сужение Дике. Иными словами, обусловленное столкновениями уширение линий должно быть меньше доплеровской ширины. Выразить это условие через сечение  $\sigma_{\text{pb}}$  уширения давлением. Преобразовать  $\sigma_{\text{pb}}$  в коэффициент уширения давлением  $\eta_{\text{pb}}$  (в МГц/торр). Сравнить полученное значение с типичной величиной  $\sim 10$  МГц/торр.

<sup>1)</sup> Эти результаты были получены на содержащей пары  $^{85}\text{Rb}$  газовой кювете диаметром 10 см с антирелаксационным парафиновым покрытием (Александров и др. 2002). При выбранной плотности паров длина поглощения в этом эксперименте была сопоставима с диаметром кюветы. Атомы освещались лазерным излучением, частота которого соответствовала одной из сверхтонких компонент D1-перехода. Лазерное излучение осуществляло оптическую накачку атомов (задача 3.10), в результате чего одна сверхтонкая компонента основного состояния опустошалась, и поглощение света падало. Когда к системе прикладывалось микроволновое поле, резонансное переходу между сверхтонкими подуровнями, атомы переводились назад на сверхтонкий подуровень, и поглощение света восстанавливалось. Так можно регистрировать микроволновой переход, измеряя оптическое пропускание в зависимости от частоты микроволнового поля (рис. 5.2).

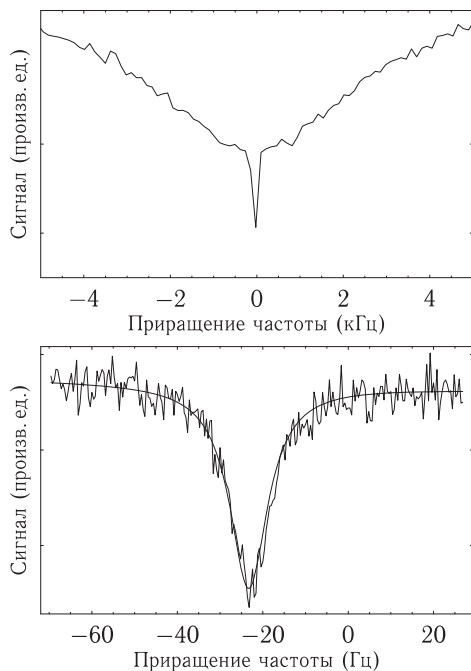


Рис. 5.2. Экспериментальные данные [Budker и др. (2003)], демонстрирующие сужение Дике микроволнового перехода (подробности — в тексте). Приведенные спектры соответствуют переходу  $F = 3, M = 0 \rightarrow F' = 2, M' = 0$  изотопа рубидия  $^{85}\text{Rb}$ . Такие «0–0» сверхтонкие переходы в атомах щелочных металлов, почти нечувствительные к магнитным полям, находят применение в стандартах частоты (атомные часы, см. [Audoin и Guinot (2001), Mayor (1998)]). На нижнем рисунке показана с увеличением бездоплеровская особенность спектра, представленного на верхнем рисунке. На нижнем рисунке также показана лоренцева аппроксимация пика, наложенная на фоновый уровень сигнала. Ширина лоренцева контура (полная ширина на полувысоте) составляет 10,9(3) Гц что, из-за остаточного светового уширения, несколько превышает «собственную» ширину перехода 8,7 Гц, определяемую столкновениями со стенками. Центральная частота имеет ненулевой сдвиг относительно частоты перехода свободного атома из-за фазовых сдвигов при столкновениях со стенками (задача 5.2)

### Решение

(а) Будем рассматривать излучающий атом с меняющейся скоростью как осциллятор с меняющейся (модулированной) частотой. Как показано в задаче 8.3, с качественной точки зрения различаются два предельных случая. Когда индекс модуляции, т.е. отношение амплитуды модуляции к частоте модуляции, велико, мы имеем широкий, существенно непрерывный спектр с шириной, определяемой амплитудой модуляции. В данной задаче аналогом амплитуды частотной модуляции служит доплеровская ширина, а аналогом частоты модуляции — частота изменяющихся скорость столкновений. Таким образом, упомянутый широкий непрерывный спектр соответствует доплеровски уширенному спектру в отсутствие столкновений.

В противном случае, когда индекс модуляции мал, в спектре обнаруживаются две боковые полосы, разнесенные на частоту модуляции. Амплитуда этих полос

по отношению к центральной несмещенному пику линейно спадает с уменьшением индекса модуляции. Этот режим соответствует эффекту сужения Дике.

Индекс модуляции по порядку величины равен единице, когда частота меняющихся скорость столкновений сравнивается с доплеровской шириной  $\Gamma_D$  для свободных атомов:

$$\Gamma_D \sim \frac{\bar{v}}{L}, \quad (5.16)$$

где

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} \quad (5.17)$$

— тепловая скорость атомов ( $M$  — атомная масса).

Если атом движется без возмущений, то его доплеровский сдвиг  $\Delta\omega_D$  дается выражением

$$\Delta\omega_D = \omega \frac{v}{c} = \frac{2\pi v}{\lambda} = \frac{2\pi}{t_\lambda}, \quad (5.18)$$

где  $t_\lambda$  — время, которое требуется атому, чтобы пройти расстояние  $\lambda$ . Из известных представлений Фурье можно заключить, что этот результат остается справедливым и когда скорость меняется. В случае, когда  $L \ll \lambda$  атом испытывает случайные блуждания, и среднее смещение  $\delta$  за время  $t$  описывается выражением

$$\delta = L \sqrt{\frac{vt}{L}}, \quad (5.19)$$

где подкоренное выражение — это число шагов в случайном блуждании. Следовательно, при  $L \ll \lambda$

$$t_\lambda = \frac{\lambda^2}{Lv}, \quad (5.20)$$

и остаточная доплеровская ширина дается выражением

$$\Gamma_D \sim 2\pi \frac{L\bar{v}}{\lambda^2}. \quad (5.21)$$

Как следует из выражений (5.16) и (5.21), условие, что атомы меняют направление скорости достаточно часто для того, чтобы наблюдалось сужение Дике, означает, что средняя длина свободного пробега должна быть много короче длины волны излучения.

**(б) Для оптического перехода**

$$\frac{\lambda}{2\pi} \sim 10^{-5} \text{ см.} \quad (5.22)$$

Средняя длина свободного пробега равна  $(n\sigma_{\text{вс}})^{-1}$ , где  $n$  — концентрация окружающего газа. Следовательно условие, накладываемое на  $n$ , имеет вид

$$n \gtrsim 10^{20} \text{ см}^{-3}, \quad (5.23)$$

что дает  $10^4$  тор (или 10 атм).

(в) Условие, что внутреннее состояние атома не меняется при изменяющемся скорости столкновении можно записать в виде

$$\sigma_{\text{pb}} \ll \sigma_{\text{вс}}. \quad (5.24)$$

Время между столкновениями, меняющими внутреннее состояние атома, описывается формулой

$$t_c \sim \frac{1}{n\sigma_{\text{pb}}\bar{v}}, \quad (5.25)$$

а соответствующее спектральное уширение имеет вид

$$\Gamma_{\text{pb}} \sim n\sigma_{\text{pb}}\bar{v}. \quad (5.26)$$

Если  $\sigma_{\text{pb}} \ll 10^{-15} \text{ см}^2$ , то, используя тот факт, что 1 тор соответствует концентрации  $n \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , а  $\bar{v} \approx 3 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ , мы находим оценку для коэффициента уширения давлением:

$$\eta_{\text{pb}} \ll \frac{(10^{16} \text{ см}^{-3}) \times (10^{-15} \text{ см}^2) \times (3 \cdot 10^4 \text{ см/с})}{2\pi} \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ МГц/тор}. \quad (5.27)$$

Это значительно меньше типичных значений  $\eta_{\text{pb}} \sim 10 \text{ МГц/тор}$ , что указывает на тот факт, что наблюдение индуцированного буферным газом сужения Дике на оптическом переходе (если оно вообще возможно) требует ситуации, при которой уширение давлением является аномально малым. Оптические переходы с малой величиной уширения давлением, приближающейся к этому значению, иногда наблюдаются для внутренних оболочек редкоземельных атомов [Александров и др. (1984), Веденин и др. (1986), Барков и др. (1989)]. Однако, несмотря на несколько экспериментальных попыток, индуцированное буферным газом сужение Дике на оптическом переходе пока обнаружить не удалось<sup>1)</sup>.

## 5.4. Базовые понятия спин-обмена

Спиновый обмен (СО) это термин, относящийся к широкому кругу столкновительных процессов, происходящих с переносом поляризации от одного атома к другому, или, в некоторых случаях, со столкновительной релаксацией атомной поляризации. Спиновый обмен важен, например, при оптической ориентации щелочных атомов, когда он является основным фактором, определяющим равновесное состояние атомной поляризации, а также динамику накачки и релаксации. Основная область применения спин-обменных столкновений связана с поляризацией систем, чья прямая оптическая накачка затруднена, как, например, при ядерной поляризации инертных газов, создаваемой путем спин-обменных столкновений с оптически ориентированными атомами щелочных металлов.

<sup>1)</sup> Это утверждение не точно. Небольшое, но достоверно наблюдаемое сужение Дике обнаружено методом КАРС-спектроскопии на линии 1,14 мкм туллия при давлении гелия в окрестности десятка атмосфер (см., например, Коновалов И. Г., Кулясов В. Н., Морозов В. Б., Тункин М. Г. // Оптика и спектроскопия. 1994. Т. 77, № 3. С. 329–333). Кроме того, ранее сужение Дике наблюдалось в колебательных спектрах молекул, правда, в более длинноволновой области: водород — 2,4 мкм, хлористый водород — 3,5 мкм. — *Примеч. ред.*

Существует несколько обзоров, таких как [Happer (1972), Happer и van Wijngaarden (1987), Knize и др. (2003)], в которых описывается физика и приложения спин-обменных столкновений. В данной задаче мы обсудим некоторые базовые идеи и основные результаты теории СО.

Рассмотрим столкновение двух атомов А и В с  $j = s = 1/2$ . Для любой выбранной оси квантования для каждого атома существуют два возможных спиновых состояния — со спином «вверх»  $|+\rangle$  и со спином «вниз»  $|-\rangle$ . Спин-обменное столкновение соответствует столкновению атома со спином вверх с атомом со спином вниз, при котором первый атом выходит из столкновения со спином вниз, а второй — со спином вверх, например,

$$|+\rangle_A |-\rangle_B \rightarrow |-\rangle_A |+\rangle_B. \quad (5.28)$$

До столкновения полный спин двух атомов может быть равным либо нулю (синглет), либо единице (триплет). Процесс СО можно проследить, рассматривая различие межатомных потенциалов для этих двух случаев; это различие тесно связано с идеей *обменного взаимодействия*, которая обсуждалась в задаче 1.2. В синглетном состоянии пространственные распределения электронов могут перекрываться (поскольку спиновая волновая функция антисимметрична, то пространственная волновая функция симметрична), и возможно образование устойчивой молекулы, в которой волновая функция электронов сконцентрирована между двумя ядрами, связывая их между собой. Действительно, большая часть наиболее распространенных двухатомных молекул имеет основное состояние  $^1\Sigma^+$  (полносимметричное, с нулевым полным спином, см. задачу 7.4 и Приложение С). В триплетном состоянии электроны стремятся удалиться друг от друга, и образование связанного молекулярного состояния при этом практически невозможно. Поэтому триплетный потенциал либо является полностью расталкивающим (например при столкновениях Н-Н), либо содержит очень мелкий минимум при большом межъядерном расстоянии. В противоположность этому синглетный потенциал имеет довольно глубокую потенциальную яму ( $\sim \text{эВ}$ ) и, исключая очень малые расстояния ( $\sim a_0$ ), является притягивающим. На рис. 5.3 показаны модельные потенциалы, иллюстрирующие это фундаментальное различие между двумя случаями.

Межатомный потенциал можно разложить на две части: независимую от спина  $V_0(r)$  и зависящую от спина  $V_1(r)$ :

$$V(r) = V_0(r) + \vec{S}_A \cdot \vec{S}_B V_1(r). \quad (5.29)$$

**(а)** Представить в явном виде триплетный и синглетный потенциалы  $V_t(r)$  и  $V_s(r)$  через потенциалы  $V_0(r)$  и  $V_1(r)$ .

**(б)** Оценить по порядку величины сечение СО. Можно воспользоваться информацией, представленной на рис. 5.3, и считать, что при межатомных расстояниях  $\gtrsim 10 \text{ \AA}$  можно положить  $V_1(r) \propto r^{-6}$  (потенциал Ван дер Ваальса). Какие характеристики углового момента сохраняются при СО столкновениях?

**(в)** Показать, что адекватное выражение для «оператора спин-обмена» имеет вид

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} + 2\vec{S}_A \cdot \vec{S}_B. \quad (5.30)$$

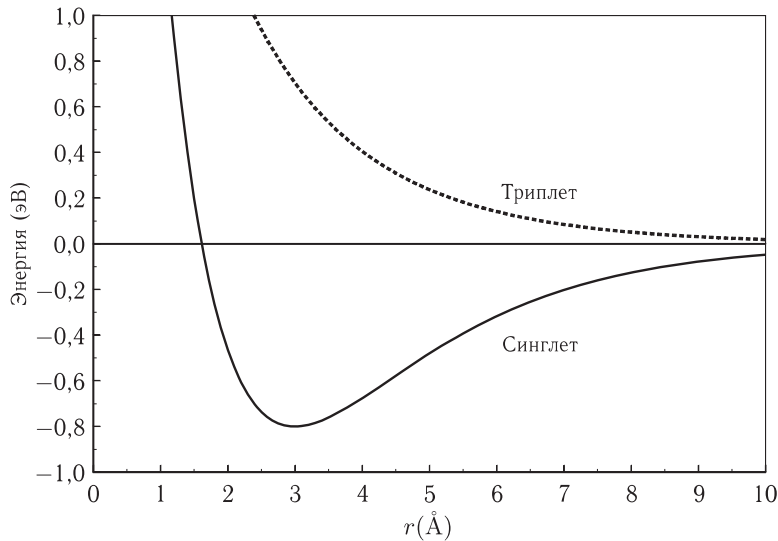


Рис. 5.3. Типичные кривые межатомного потенциала для атомов со спинами  $1/2$  и с полным спином, соответствующим триплетному (штриховая линия) и синглетному (сплошная линия) состояниям. Синглетное состояние соответствует молекулярному терму  $^1\Sigma^+$  (например основное состояние щелочного димера), а триплетное состояние соответствует молекулярному терму  $^3\Sigma^+$

### Решение

(а) Форма потенциала триплетного и синглетного состояний следует из выражения (5.29) и прямой оценки величины

$$\vec{S}_A \cdot \vec{S}_B = \frac{S^2 - S_A^2 - S_B^2}{2} = \frac{1}{2} \left[ S(S+1) - \frac{3}{2} \right], \quad (5.31)$$

откуда мы получаем

$$V_t(r) = V_0(r) + \frac{1}{4} V_1(r) \quad (5.32)$$

и

$$V_s(r) = V_0(r) - \frac{3}{4} V_1(r). \quad (5.33)$$

Здесь  $\vec{S} = \vec{S}_A + \vec{S}_B$  — полный спин сталкивающейся пары атомов.

(б) Разность  $V_1(r)$  между триплетным и синглетным потенциалами имеет электростатическую природу (подобно энергетической разности между различными спиновыми состояниями в многоэлектронных атомах, см. задачу 1.2) и, следовательно, имеет порядок электронвольта на ангстрем (рис. 5.3).

Рассмотрим столкновение атома со спином вверх с атомом со спином вниз. Первоначально, когда атомы находятся далеко друг от друга, мы можем представить их волновую функцию  $|\psi\rangle$  как суперпозицию синглетного  $|0,0\rangle$  и триплетного  $|1,0\rangle$  состояний (здесь мы пользуемся обозначениями  $|S, M_S\rangle$ ):

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_A |-\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1,0\rangle + |0,0\rangle). \quad (5.34)$$

Когда атомы оказываются на достаточно малом расстоянии друг от друга, триплетное и синглетное состояния, благодаря потенциалу  $V_1(r)$ , приобретают относительный фазовый сдвиг:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle + e^{i\Delta\phi(t)}|0, 0\rangle), \quad (5.35)$$

где

$$\Delta\phi(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t V_1[r(t)] dt. \quad (5.36)$$

Для грубой оценки мы выразим накопленную при столкновении разность фаз  $\Delta\phi$  через длительность столкновения  $\tau_c = r_c/v$ , где  $r_c$  — среднее расстояние между атомами при столкновении, а  $v$  — их относительная скорость:

$$\Delta\phi \sim V_1(r_c) \frac{\tau_c}{\hbar} \sim V_1(r_c) \frac{r_c}{\hbar v}. \quad (5.37)$$

Когда  $\Delta\phi \approx \pi$ , то, как видно из выражения (5.35), волновая функция, описывающая атомы, приобретает вид  $|\rightarrow\rangle_A |\rightarrow\rangle_B$ , т. е. действительно происходит СО. Таким образом условие спинового обмена можно представить в виде

$$V_1(r_c) r_c \sim \pi \hbar v \sim \pi \hbar c \frac{v}{c} \sim 6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ} \cdot \text{\AA}, \quad (5.38)$$

где мы приняли, что  $v \sim 3 \cdot 10^4$  см/с, что действительно так для типичных атомных паров при комнатной температуре<sup>1)</sup>. Из графика, приведенного на рис. 5.3, мы видим, что при  $r \sim 10 \text{ \AA}$  мы имеем  $V_1(r) \sim 0,1$  эВ, поэтому, в соответствии с тем фактом, что в области  $r \gtrsim 5 \text{ \AA}$ ,  $V_1(r)$  меняется по закону  $\propto r^{-6}$ ,

$$V_1(r) = \frac{10^5}{[r(\text{\AA})]^6} \text{ эВ}, \quad r \gtrsim 10 \text{ \AA}. \quad (5.39)$$

В сочетании с требованием (5.38), мы получаем

$$r_c \sim 25 \text{ \AA}. \quad (5.40)$$

Таким образом по порядку величины  $\sigma_{se} \sim 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2$ . По причине грубости этой оценки, она оказывается завышенной приблизительно на порядок величины — типичные значения сечения спинового обмена для атомов щелочных металлов составляют

$$\sigma_{se} \sim 2 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2. \quad (5.41)$$

Хотя спины отдельных атомов меняются при столкновениях, *полный спин* системы приблизительно сохраняется. (Существуют так называемые эффекты разрушения спина с сечениями на несколько порядков величины более низкими (см. задачу 5.8), но их обсуждение выходит за рамки нашего рассмотрения.)

<sup>1)</sup> Априори не ясно, должна ли скорость  $v$  быть тепловой скоростью или скоростью, определяемой кинетической энергией, которую приобретает атом при его «скатывании» с потенциального «холма». Однако наши последующие оценки показывают, что расстояние  $r_c$  достаточно велико, чтобы можно было использовать тепловую скорость в качестве  $v$  (см. (5.40)).

(в) Применимый к данному случаю оператор спинового обмена  $\mathcal{P}$  должен обладать следующими свойствами:

$$\mathcal{P}|+\rangle_A|+\rangle_B = |+\rangle_A|+\rangle_B, \quad (5.42)$$

$$\mathcal{P}|+\rangle_A|-\rangle_B = |-\rangle_A|+\rangle_B, \quad (5.43)$$

$$\mathcal{P}|-\rangle_A|+\rangle_B = |+\rangle_A|-\rangle_B, \quad (5.44)$$

$$\mathcal{P}|-\rangle_A|-\rangle_B = |-\rangle_A|-\rangle_B. \quad (5.45)$$

Вводя стандартные операторы повышения и понижения для спина  $1/2$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (5.46)$$

и записывая

$$S_x = \frac{1}{2} (S_+ + S_-), \quad (5.47)$$

$$S_y = \frac{1}{2i} (S_+ - S_-), \quad (5.48)$$

можно представить оператор (5.30) в виде

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} + 2S_z^A S_z^B + S_+^A S_-^B + S_-^A S_+^B. \quad (5.49)$$

Из этого выражения легко видеть, что оператор  $\mathcal{P}$  действительно обладает требуемыми свойствами (5.42)–(5.45).

## 5.5. Приближение спиновой температуры

Во многих экспериментах по оптической накачке с использованием циркулярно поляризованного света спиновый обмен является самым быстрым процессом в системе — его характерные скорости превышают как скорость накачки, так и скорость релаксации, связанной с иными столкновительными процессами (например, со столкновениями со стенками кюветы). В этом случае распределение атомов по различным зеемановским подуровням может быть описано *спиновой температурой* ( $\beta^{-1}$ ) [Anderson и др. (1960)] в соответствии с соотношением

$$\rho(F_z) \propto e^{\beta F_z}, \quad (5.50)$$

где  $\rho(F_z)$  — населенность данного зеемановского подуровня.

Получить распределение (5.50) из первых принципов в предположении, что полный угловой момент системы  $N\langle F_z \rangle$  сохраняется ( $N$  — полное число атомов на уровне  $F$ ) и что система находится в статистическом равновесии.

### Решение

Атомы в рассматриваемой системе могут быть распределены по зеемановским подуровням множеством различных способов, при которых на  $i$ -м уровне находятся  $N_i$  атомов. Каждое такое распределение должно удовлетворять условиям, что полное число атомов равно  $N$ :

$$\sum_i N_i = N, \quad (5.51)$$

и что полный угловой момент равен

$$\sum_i N_i (F_z)_i = N \langle F_z \rangle. \quad (5.52)$$



Для заданного набора величин  $N_i$  подсчитаем число способов, которыми он может быть реализован (мы здесь считаем, что газ является невырожденным, так что атомы являются различимыми). Мы имеем  $N$  атомов,  $N_1$  из которых мы хотим поместить на первом подуровне. Число способов, которыми мы это можем сделать, равно (см. например, [Reif (1965)])

$$\Omega_1 = \frac{N!}{(N_1)!(N - N_1)!}. \quad (5.53)$$

Если на первом подуровне находятся  $N_1$  атомов, то мы имеем

$$\Omega_2 = \frac{(N - N_1)!}{(N_2)!(N - N_1 - N_2)!} \quad (5.54)$$

способов расположить  $N_2$  атомов на втором зеемановском подуровне и т. д. Число способов, каким может быть реализован данный набор  $N_i$ , равно, таким образом:

$$\Omega = \prod \Omega_i = \frac{N!}{N_1! \dots N_i! \dots}. \quad (5.55)$$

Согласно общим принципам статистической механики, распределение  $N_i$  при равновесии должно быть таким, чтобы величина (5.55) являлась максимальной при условиях (5.51) и (5.52). Другими словами, все разрешенные конфигурации являются равновероятными, и равновесное состояние соответствует распределению населенностей, которое может быть реализовано максимальным числом способов.

Вместо того, чтобы непосредственно максимизировать величину (5.55), удобнее максимизировать ее логарифм

$$\sigma = \ln \Omega \approx N \ln N - N - \sum_i (N_i \ln (N_i) - N_i), \quad (5.56)$$

где мы использовали формулу Стирлинга для разложения логарифмов больших чисел.

Чтобы найти максимум (5.56) при выполнении условий (5.51) и (5.52), мы используем метод множителей Лагранжа (см., например, [Reif (1965)]) и приравниваем нулю производные величин

$$\Phi = \sigma + \alpha \sum N_i + \beta \sum_i N_i (F_z)_i, \quad (5.57)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — множители Лагранжа<sup>1)</sup>. Мы имеем

$$\frac{\partial \Phi}{\partial N_i} = -\ln (N_i) + \alpha + \beta (F_z)_i = 0, \quad (5.58)$$

что дает

$$N_i = e^{\alpha + \beta (F_z)_i} = C e^{\beta (F_z)_i}. \quad (5.59)$$

Постоянные  $C$  и  $\beta$  могут быть определены из выражений (5.51) и (5.52).

<sup>1)</sup> Идея метода множителей Лагранжа может быть понята следующим образом. Целью служит максимизация функции  $f(x)$  относительно некоторой переменной  $x$ , которая подвержена ряду ограничений  $\{g(x) = 0, h(x) = 0, \dots\}$ . Производные ограничивающих функций по  $x$  предполагаются равными нулю, так что производная функции  $f(x) + ag(x) + bh(x) + \dots$ , где  $a$  и  $b$  — константы, тоже равна нулю в максимуме функции  $f(x)$ . Это позволяет определить  $f(x)$  через константы  $a, b, \dots$ . Вслед за этим, выбирая значения констант  $a, b, \dots$ , мы можем обеспечить выполнение ограничений и максимизацию функции  $f(x)$ .

Концепция спиновой температуры чрезвычайно полезна для понимания различных аспектов экспериментов по оптической накачке; соответствующим примером может служить задача 5.7.

## 5.6. Столкновения, приводящие к хаотизации

Рассмотрим *хаотизирующие электронный спин* столкновения атомов  $J = S = 1/2$ , например, с атомами буферного газа, не обладающими спином. После такого столкновения электронная поляризация атома оказывается полностью случайной, независимо от его поляризации до столкновения. В данной задаче мы рассмотрим влияние ядерного спина  $I$  на релаксацию атомной поляризации.

Полагая, что длительность столкновения много меньше обратной частоты сверхтонкого расщепления и что  $I \gg 1/2$ , оценить, какое время требуется для релаксации атомной поляризации, если характерное время электронной хаотизации равно  $\tau^1$ ).

### Решение

Пусть, например, в исходном состоянии атом находится в «вытянутом» состоянии ( $J_z = J, S_z = S$ ). После одного хаотизирующего столкновения атомная поляризация хоть и уменьшается, но не разрушается полностью, поскольку большая часть углового момента атома была связана с ядром (при  $I \gg 1/2$ ). После столкновения сверхтонкое взаимодействие связывает электронный и ядерный спины, и результирующее изменение  $M_F$  равно либо нулю, либо единице. При последующих столкновениях изменение  $M_F$  будет равно 0, 1 или  $-1$ , и процесс можно рассматривать как *случайные блуждания*. Поскольку возможно примерно  $2I + 1$  различных значений  $M_F$ , требуется примерно  $(2I + 1)^2$  шагов случайных блужданий, чтобы распределить населенности по всем подуровням (в этой точке поляризация теряется). Таким образом, соответствующий масштаб времени дается выражением

$$\tau' = (2I + 1)^2 \tau. \quad (5.60)$$

## 5.7. Ларморова прецессия в условиях быстрого спинового обмена

Рассмотрим пары щелочных атомов в основном электронном состоянии ( $S = J = 1/2$ , ядерный спин  $I$ ) в магнитном поле  $B$ . Пусть плотность щелочных атомов так велика, что скорость спин-обмена (задача 5.4) значительно превосходит ларморову частоту  $\Omega_L$  атома.

Определить скорость магнитной прецессии вектора среднего магнитного момента  $\langle \vec{F} \rangle$ . Сравнить результат с ларморовой частотой свободного атома.

Считать, что атомы имеют ненулевую среднюю степень ориентации, но их спиновая температура (задача 5.5) высока:  $1/\beta \gg 1$ . Влиянием внешнего магнитного поля на ядерный магнитный момент можно пренебречь.

<sup>1)</sup> В общем случае эволюция атомной поляризации, в такой ситуации, является достаточно сложной и для многих наблюдаемых (например,  $\langle S_z \rangle$ ) релаксация описывается более чем одной экспонентой [Boushiat (1953); см., также Harper (1972), Knize и др. (1988)]. Здесь нас интересует максимальный временной масштаб, в течение которого сохраняется атомная поляризация.

Режим быстрого спин-обмена, впервые исследованный Хаппером с сотрудниками, [Happer и Tang (1973), Happer и Tam (1977)], важен для высокочувствительных атомных магнитометров, разработанных для биомангнитных исследований [Kominis и др. (2003)].

### Решение

Для начала пренебрежем внешним магнитным полем и примем, что направление ориентации совпадает с осью квантования ( $z$ ). Идея решения состоит в том, чтобы рассчитать средний полный угловой момент ансамбля  $\langle F_z \rangle$  и средний электронный спин  $\langle S_z \rangle$ . Мы можем также принять, что слабое магнитное поле величиной  $B$  (для которого магнитная прецессия много медленнее, чем спиновый обмен) направлено, например, перпендикулярно оси  $\hat{z}$ , что создает момент силы величиной  $g_S \mu_0 B \langle S_z \rangle$  на ансамбле атомов. Величина ларморовой частоты теперь может быть найдена по формуле

$$\Omega_L = \frac{g_S \mu_0}{\hbar} \frac{\langle S_z \rangle}{\langle F_z \rangle} B = \frac{2\mu_0}{\hbar} \frac{\langle S_z \rangle}{\langle F_z \rangle} B. \quad (5.61)$$

В модели спиновой температуры средняя населенность подуровня с магнитным квантовым числом  $M_F$  для высокой спиновой температуры дается формулой

$$\rho(M_F) = \frac{1 + \beta M_F}{2(2I + 1)}, \quad (5.62)$$

что справедливо для всех сверхтонких состояний. В формуле (5.62) мы нормировали населенность на полное число подуровней сверхтонкой структуры для состояния с  $J = 1/2$ .

Для среднего углового момента мы имеем

$$\langle F_z \rangle = \sum_{F=I-1/2}^{I+1/2} \sum_{M_F=-F}^F \rho(M_F) M_F = \left[ \frac{1}{4} + \frac{1}{3} I(I+1) \right] \beta, \quad (5.63)$$

где мы провели прямое суммирование, используя формулу (5.62).

Для состояния  $|F, M_F\rangle$  мы можем найти среднее значение  $S_z$ , аналогично тому, как мы определяли  $g_F$ -факторы в задаче 2.4:

$$\langle F, M_F | S_z | F, M_F \rangle = \frac{F(F+1) + I(I+1) - 3/4}{2F(F+1)} M_F. \quad (5.64)$$

Теперь усредняем по ансамблю:

$$\langle S_z \rangle = \sum_{F=I-1/2}^{I+1/2} \sum_{M_F=-F}^F \rho(M_F) \langle F, M_F | S_z | F, M_F \rangle = \beta/4. \quad (5.65)$$

Аналогично

$$\langle I_z \rangle = \sum_{F=I-1/2}^{I+1/2} \sum_{M_F=-F}^F \rho(M_F) \langle F, M_F | I_z | F, M_F \rangle = \frac{1}{3} I(I+1) \beta. \quad (5.66)$$

Не удивительно, что сумма средних угловых моментов (5.65) и (5.66) дает полный средний угловой момент в согласии с (5.63).

Теперь, когда мы нашли  $\langle F_z \rangle$  и  $\langle S_z \rangle$ , мы можем рассмотреть влияние магнитного поля. Подставляя (5.65) и (5.63) в (5.61), мы находим

$$\Omega_L = \frac{2\mu_0}{\hbar} \frac{1}{1 + \frac{4}{3}I(I+1)} B. \quad (5.67)$$

Мы можем теперь сравнить эту частоту с ларморовой частотой  $\Omega_L^F$  для свободного атома в заданном сверхтонком состоянии (задача 2.4)

$$\Omega_L^F = \frac{2\mu_0}{\hbar} \frac{1}{2I+1} B. \quad (5.68)$$

Сопоставляя это выражение с (5.67), мы находим, что

$$\Omega_L = \frac{3(2I+1)}{3+4I(I+1)} \Omega_L^F. \quad (5.69)$$

Интересно отметить, что когда атом мечется между состояниями с  $F = I + 1/2$  и  $F = I - 1/2$ , у которых знаки  $g_F$ -факторов противоположны (и равны по величине), средний спин испытывает результирующее магнитное вращение, которое является не намного более медленным, чем «нормальная» магнитная прецессия. Например, для атома с  $I = 3/2$  (типа  $^{87}\text{Rb}$ )  $\Omega_L = 2/3 \cdot \Omega_L^F$ . Направление прецессии совпадает с таковым для свободного атома в сверхтонком состоянии  $F = I + 1/2$ . Причина того, что это состояние «доминирует» в прецессии среднего спина, состоит в том, что оно имеет большее число зеемановских подуровней (более высокий статистический вес) и что в распределении, управляемом спиновой температурой, разница населенностей между подуровнями  $\pm M_F$  максимальна для крайних подуровней с  $|M_F| = I + 1/2$ , которые отсутствуют для другого сверхтонкого состояния.

## 5.8. Ионизация Пеннинга для метастабильного атома гелия

*Ионизация Пеннинга* — это процесс, при котором сталкиваются два атома, находящиеся в метастабильном состоянии, и энергия возбуждения одного из них передается другому, приводя к его ионизации.

Примером ионизации Пеннинга может служить процесс столкновения двух атомов  $^4\text{He}$  (ядерный спин  $I = 0$ ) в метастабильном состоянии  $^3S_1$  ( $^4\text{He}^*$ ), приводящий к образованию одного атома He в основном состоянии, иона  $\text{He}^+$  и электрона. В общем случае сечение такого процесса весьма велико (порядка  $10^{-13} \text{ см}^2$  или больше), однако, если все метастабильные атомы гелия находятся в одном из крайних зеемановских подуровней ( $M = 1$  или  $M = -1$ ), тогда скорость процесса пеннинговской ионизации оказывается подавленной на несколько порядков величины [Fedichev и др. (1996)]. Это подавление сыграло решающую роль в успешных экспериментах, в которых была впервые продемонстрирована бозе-эйнштейновская конденсация атомов  $^4\text{He}^*$  [Robert и др. (2001), Dos Santos и др. (2001)].

В этой задаче мы обсудим причины подавления ионизации Пеннинга для поляризованных атомов  $\text{He}^4$  в состоянии  $2^3S_1$  и оценим по порядку величины степень этого подавления.

(а) Рассмотреть качественно причины подавления ионизации Пеннинга в поляризованном  $^4\text{He}^*$ .

(б) Чтобы оценить степень подавления ионизации Пеннинга для поляризованных атомов по сравнению с неполяризованными, мы должны идентифицировать процесс, ведущий к ионизации. Рассмотрим два атома, находящихся в состояниях  $M = 1$ . Поскольку проекция полного углового момента  $M_{pair} = 2$ , полный спин системы  $S = 2$ . Оказывается, что основной механизм ионизации Пеннинга такого спин-поляризованного образца определяется участием диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами, связанными с атомными спинами. Потенциал такого взаимодействия имеет вид

$$H_d = \frac{4\mu_0^2}{R^3} \left[ \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \frac{3(\vec{S}_1 \cdot \vec{R})(\vec{S}_2 \cdot \vec{R})}{R^2} \right]. \quad (5.70)$$

Здесь  $\vec{S}_{1,2}$  — спиновые операторы двух атомов,  $R$  — расстояние между ядрами атомов, и множитель 4 берется из квадрата фактора Ланде.

Показать, что взаимодействие (5.70) не сохраняет полный спин пары и оценить это взаимодействие по порядку величины.

(в) Согласно результатам п. (б), когда два атома сталкиваются, их полный спин имеет конечную вероятность измениться в процессе столкновения (полный угловой момент сохраняется, тогда как спиновый угловой момент и угловой момент относительного движения атомов могут обмениваться друг с другом). Если такое происходит, то спиновое подавление ионизации Пеннинга снимается, и столкновения с большой вероятностью приводят к ионизации атомов.

Оценить по порядку величины вероятность  $P$  изменения полного спина в предположении, что характерные радиусы всех взаимодействий по порядку величины равны  $a_0$  и что глубина межатомного потенциала  $\sim 1$  эВ. Величина  $P$  дает оценку отношения сечений ионизации Пеннинга для поляризованных и неполяризованных атомов.

### Подсказка

В п. (б) чтобы показать, что полный спин не сохраняется, достаточно явным образом вычислить матричные элементы  $\langle S = 0, M = 0 | H_d | S = 2, M = 2 \rangle$ .

### Решение

(а) Полный начальный спин пары сталкивающихся поляризованных атомов  $\text{He}^*$  равен двум ( $S = 2$ ). Если происходит ионизация Пеннинга, конечное состояние включает в себя две частицы со спином  $1/2$  (ион  $\text{He}^+$  и электрон) и одну частицу со спином равным нулю (атом  $\text{He}$  в основном состоянии); таким образом максимальный полный спин конечного состояния  $S = 1$ . Следовательно, ионизация Пеннинга подавлена: она требует изменения полного спина, которое не может возникнуть при сильном электрическом взаимодействии, ответственном за большую часть процессов атомных столкновений. Это подавление аналогично таковому в излучательных переходах (где переходы с переворотом спина, или *интеркомбинационные* переходы, обычно подавлены на несколько порядков величины). Другим примером подобного эффекта может служить относительное подавление спиновой деструкции в сравнении со спин-обменными столкновениями (задача 5.4).

**(б)** Можно показать, что полный спин не сохраняется при диполь-дипольном взаимодействии, используя тот факт, что гамильтониан (5.70) не коммутирует с оператором

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2. \quad (5.71)$$

Первый член в (5.70) коммутирует с  $S^2$ , поэтому некоммутирующим должен быть второй член. Однако, вместо того чтобы определить коммутатор, мы рассчитаем конкретный матричный элемент, как это предлагалось в Подсказке.

Начальное и конечное состояния разлагаются на состояния отдельных спинов согласно соотношениям

$$|S = 2, M = 2\rangle = |1\rangle_1 |1\rangle_2, \quad (5.72)$$

$$|S = 0, M = 0\rangle = \frac{|1\rangle_1 | -1\rangle_2 + | -1\rangle_1 |1\rangle_2 - |0\rangle_1 |0\rangle_2}{\sqrt{3}}. \quad (5.73)$$

Здесь мы использовали обозначение  $|M_i\rangle$  для  $i$ -го спина. По вышеуказанным причинам, только второй член в (5.70) вносит вклад в нужный матричный элемент, так что

$$\begin{aligned} \langle S = 0, M = 0 | H_d | S = 2, M = 2 \rangle &\propto \\ &\propto \langle S = 0, M = 0 | (\vec{S}_1 \cdot \vec{R}) (\vec{S}_2 \cdot \vec{R}) | S = 2, M = 2 \rangle. \end{aligned} \quad (5.74)$$

Пользуясь разложением на сферические компоненты ( $V_0 = V_z$ ;  $V_{\pm} = \mp(V_x \pm iV_y)/\sqrt{2}$ ),

$$\vec{S}_i \cdot \vec{R} = (S_0)_i R_0 - (S_+)_i R_- - (S_-)_i R_+, \quad (5.75)$$

и используя выражения (5.72) и (5.73), мы находим, что матричный элемент в правой части выражения (5.74) не равен нулю ( $R_+^2/\sqrt{3} \neq 0$ ). Таким образом, диполь-дипольное взаимодействие не сохраняет полный спин.

**(в)** Мы будем моделировать столкновения, сопровождающиеся изменением спина, следующим образом. Рассмотрим систему, находящуюся первоначально в состоянии  $S = 2$ . Когда два сталкивающихся атома приближаются друг к другу на расстояние  $\sim a_0$ , они испытывают возмущение

$$H_d \sim \mu_0^2/a_0^3, \quad (5.76)$$

которое смешивает различные спиновые состояния. Возмущение действует на характерных временах  $a_0/v$ , где характерная скорость  $v$  дается выражением

$$v \sim \sqrt{\frac{2V_a}{m_a}}, \quad (5.77)$$

где  $m_a$  — масса атома, а межатомный потенциал  $V_a \sim 1$  эВ. Таким образом,  $v \sim 10^6$  см/с. Амплитуда вероятности обнаружения системы в состоянии  $S = 0$  растет линейно со временем в течение столкновения, так что характерная вероятность  $P$  изменения спина за время столкновения дается формулой

$$P \sim \left( \frac{\mu_0^2}{\hbar a_0^3} \frac{a_0}{v} \right)^2 \sim 10^{-5}, \quad (5.78)$$

что согласуется с более детальными расчетами [Fedichev (1996)].

## Глава 6

# ХОЛОДНЫЕ АТОМЫ

### 6.1. Лазерное охлаждение: базовые идеи (У)

Лазерное охлаждение — это важный и элегантный инструмент, который оказался полезным во многих областях атомной физики. Например, лазерное охлаждение позволило создать и исследовать бозе-эйнштейновский конденсат разреженных атомных паров [Anderson и др. (1995), Bradley и др. (1995), Davis и др., (1995)] и служит важнейшим элементом последнего поколения атомных часов [Santarelli и др. (1999)]. Создание холодных атомных газов с помощью лазерного охлаждения открыло новые возможности изучения процессов атомных столкновений, нелинейных оптических эффектов и фундаментальных квантово-механических явлений. Существует ряд прекрасных обзоров, посвященных проблемам этой огромной области физики — хорошим началом могут служить Нобелевские лекции [Chu (1998), Phillips (1998), Cohen-Tannoudji (1998)], а также книга [Metcalf и Van der Straten (1999)].

Здесь мы рассмотрим некоторые фундаментальные понятия эффекта лазерного охлаждения. В предыдущих главах содержалось много задач, связанных с воздействием света на внутренние состояния атомов (как, например, оптическая накачка (задачи 3.7, 3.9 и 3.10)), но в эффектах лазерного охлаждения и создания лазерных ловушек мы интересуемся механическим воздействием света на «внешнее» состояние атома, т. е. его положение и импульс.

Рассмотрим двухуровневый атом, находящийся изначально в покое. Пусть атом подвергается облучению световым пучком, настроенным в резонанс с переходом  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  (где  $|g\rangle$  — основное, а  $|e\rangle$  — возбужденное состояние атома). Если фотон поглощается атомом, то атом приобретает импульс  $\Delta\vec{p}$ , где

$$\Delta\vec{p} = M\Delta\vec{v} = \hbar\vec{k}, \quad (6.1)$$

$M$  — масса атома,  $\Delta\vec{v}$  — изменение скорости атома, а  $\vec{k}$  — волновой вектор падающего фотона.

Мы должны также учитывать спонтанное излучение. Фотон флуоресценции излучается атомом в случайном направлении. (На самом деле, как говорилось в задаче 3.8, может существовать выделенное направление, зависящее, например, от поляризации падающего света, но на данном этапе рассмотрения это не существенно.) Следовательно, из-за спонтанного излучения атом испытывает отдачу в случайном направлении.

Таким образом, мы видим, что если группа атомов подвергнута облучению резонансным лазерным пучком, атомы приобретают момент в направлении распространения пучка и нагреваются вследствие случайных толчков, связанных со спонтанно

испускаемыми фотонами. На этом основаны манипуляции движением атомов с помощью лазерных пучков.

(а) Пусть мы имеем облако двухуровневых атомов в состоянии покоя и освещаем лазерными пучками это облако с шести различных направлений, как это показано на рис. 6.1, так что создаются три пары встречных лазерных пучков в трех взаимно ортогональных направлениях. Это — установка для получения *оптической «папки»* («мелассы»). В такой гипотетической ситуации атомное облако, изначально имеющее температуру  $T = 0$ , будет разогреваться под действием света.

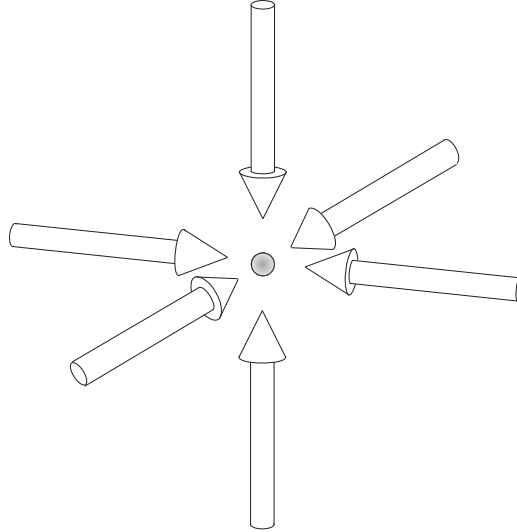


Рис. 6.1. Схема установки для получения оптического охлаждения. Шесть лазерных пучков с «красной» отстройкой (с частотой, более низкой, чем частота атомного перехода, с которым они являются почти резонансными), организованные в пары встречно направленных пучков в трех взаимно ортогональных направлениях, обеспечивают зависящую от скорости тормозящую силу, которая охлаждает атомные пары

Допустим, что мы подвергаем атомное облако действию лазерных пучков в течение времени  $\tau$ , за которое, в среднем, каждый атом испытывает один цикл поглощения/испускания (считать, что интенсивность света достаточно низка, так что вынужденным излучением можно пренебречь и что пары являются достаточно разреженными, так что пленения излучения не происходит). Какова температура  $T = 2T_\gamma$  атомного облака ( $T_\gamma$  — температурный предел однофотонной отдачи)? Сделать оценку численной величины  $T_\gamma$  для атомов натрия.

### Решение

Поскольку, в среднем, каждый атом испытывает один скачок импульса  $\Delta \vec{p}$  при акте поглощения и другой скачок  $\Delta \vec{p}'$  от акта спонтанного испускания, при том, что оба скачка имеют случайные направления и равные амплитуды, мы можем сказать, что средняя энергия атома в облаке имеет вид

$$\langle E \rangle \sim \frac{\langle (\Delta \vec{p} + \Delta \vec{p}')^2 \rangle}{2M} \sim \frac{\hbar^2 \omega^2}{Mc^2}, \quad (6.2)$$



где мы использовали выражение для полного вектора  $|\vec{k}| = \omega/c$ , где  $\omega$  — оптическая частота, а также учли, что усредненная по образцу величина  $2\vec{p} \cdot \Delta\vec{p}'$  обращается в ноль.

Это соответствует тепловой энергии  $\sim 2k_B T_\gamma$  или

$$T_\gamma \sim \frac{\hbar^2 \omega^2}{2k_B M c^2}, \quad (6.3)$$

где  $k_B \approx 10^{-4}$  эВ/К — константа Больцмана.

Для атомов натрия, возбужденных через первый резонансный переход (линия D1), мы имеем  $\hbar\omega \sim 2$  эВ и  $M c^2 \approx 23 \cdot 10^9$  эВ, и, следовательно

$$T_\gamma \sim (10^4 \text{ К/эВ}) \cdot \frac{(2 \text{ эВ})^2}{2 \times 23 \cdot 10^9 \text{ эВ}} \sim 1 \text{ мК}, \quad (6.4)$$

— действительно низкая температура!

**(б)** Обратимся снова к установке для получения оптической мелассы (рис. 6.1), но на этот раз мы покажем, как можно охладить атомный газ, изначально находящийся при высокой (например, комнатной) температуре.

Рассмотрим атом, движущийся со скоростью  $v$  вдоль одного из лазерных пучков. Частота лазерного пучка в системе координат покоящегося атома равна

$$\omega' = \omega \left( 1 + \frac{v}{c} \right). \quad (6.5)$$

Допустим, что лазерный пучок имеет «красную» отстройку, т. е. его частота  $\omega$  ниже резонансной частоты  $\omega_0$  для перехода  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  атома в покое. Тогда лазерный пучок будет преимущественно взаимодействовать с атомами, движущимися навстречу  $\vec{k}$  и, следовательно, действовать замедляющей силой в этом направлении. В оптической патоке («мелассе») атомы замедляются во всех направлениях, что, очевидно, должно приводить к их охлаждению. Оптическая патока оказывает на атомы силовое воздействие, зависящее от скорости и подобное вязкому сопротивлению, откуда и происходит такое название.

По мере того как атомы замедляются, расстройка лазерного излучения должна меняться для продолжения взаимодействия лазерного излучения с атомным газом (поскольку доплеровская ширина уменьшается). Один из способов продолжения процесса охлаждения состоит в применении «чирпа» — плавного увеличения лазерной частоты. Другой метод, широко используемый для замедления атомных пучков и обсуждаемый в задаче 6.3, использует смещение энергетических уровней в магнитном поле.

Без больших проблем можно охладить атомы до температур, при которых доплеровская ширина становится сопоставимой с естественной шириной перехода  $\gamma_0$ , поскольку когда доплеровская ширина  $\Gamma_D$  превышает  $\gamma_0$ , можно оптически селективировать группы атомов с повышенными скоростями.

Чему равна температура  $T^*$  атомного облака, когда  $\Gamma_D \sim \gamma_0$ ? Привести численную оценку  $T^*$  для атомов натрия.

### Решение

Доплеровская ширина описывается формулой

$$\Gamma_D = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{2k_B T}{M}}. \quad (6.6)$$

Приравнявая  $\Gamma_D$  величине  $\gamma_0$ , мы получаем

$$T^* \sim \gamma_0^2 \frac{Mc^2}{2k_B \omega_0^2}. \quad (6.7)$$

Для атомов натрия

$$T^* \approx 40 \text{ мК}. \quad (6.8)$$

Эта величина существенно превышает температурный предел эффекта однофотонной отдачи  $T_\gamma$  (формула (6.4)).

(в) Когда  $T^*$  достигнуто, доминирующим вкладом в ширину линии становится однородное уширение. Для дальнейшего охлаждения атомов мы должны найти подходящую величину для лазерной отстройки. Если лазер настроен таким образом, что  $\omega_0 - \omega \gg \gamma_0$ , взаимодействие света с атомами будет чрезвычайно слабым, и охлаждающий эффект будет малым. С другой стороны, если  $\omega_0 - \omega = 0$ , никакого охлаждающего действия не происходит вовсе. В качестве компромисса мы выбираем  $\omega_0 - \omega = \gamma_0/2$ .

Теперь атомы испытывают толчки во всех направлениях, но, если атом движется в направлении одного из пучков, он будет получать большее количество толчков, препятствующих его движению.

### Решение

Поскольку мы считали интенсивность света достаточно малой, чтобы пренебрегать вынужденным излучением, мы можем написать

$$\kappa = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{\gamma_0^2} \ll 1, \quad (6.9)$$

где  $\kappa$  — резонансный параметр насыщения (задача 3.7),  $d = \langle e|d|g \rangle$  — дипольный матричный элемент, а  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда электрического поля световой волны. На основе соображений, приведенных в задаче 3.7 (выражение (3.172) при  $\kappa \ll 1$ ), мы можем заключить, что частота  $R$ , с которой атомы рассеивают фотоны, имеет вид

$$R_{\pm} = \frac{\kappa \gamma_0}{1 + \left(1 \pm \frac{2\omega v}{\gamma_0 c}\right)^2}, \quad (6.10)$$

где  $\pm$  относится к лазерным пучкам, распространяющимся, соответственно, направо и налево на диаграмме в верхней части рис. 6.2. Отметим, что для целей алгебраической и концептуальной простоты, мы здесь рассматриваем случай  $\kappa \ll 1$ ; для большинства экспериментов по лазерному охлаждению типична ситуация, когда  $\kappa \lesssim 1$ .

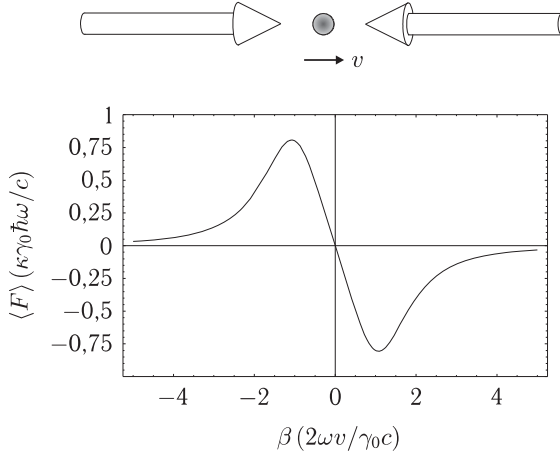


Рис. 6.2. Зависящая от скорости сила для одномерной оптической мелассы в режиме, когда  $\Gamma_D \lesssim \gamma_0$ . Заметим, что на атомы действует сила, направленная против их движения, и при скоростях  $|v| \ll \gamma_0 c / (2\omega)$  это линейно-возвратная (упругая) сила в пространстве скорости

В среднем каждый акт поглощения-испускания сопровождается изменением импульса атома на величину

$$\Delta p_{\pm} = \pm \hbar \frac{\omega}{c}. \quad (6.11)$$

Так что средняя сила, вызванная встречными лазерными пучками, равна

$$\langle F \rangle = \Delta p_+ R_+ + \Delta p_- R_- = \quad (6.12)$$

$$= \frac{\kappa\gamma_0\hbar\omega}{c} \left[ \frac{1}{1 + (1 + \beta)^2} - \frac{1}{1 + (1 - \beta)^2} \right], \quad (6.13)$$

где

$$\beta = \frac{2\omega}{\gamma_0} \frac{v}{c}, \quad (6.14)$$

откуда, после некоторых алгебраических преобразований получаем зависимость

$$\langle F \rangle = -4 \frac{\kappa\gamma_0\hbar\omega}{c} \frac{\beta}{4 + \beta^4} = -\frac{8\hbar\omega^2\kappa}{c} \frac{v/c}{4 + \left(\frac{2\omega v}{\gamma_0 c}\right)^4}, \quad (6.15)$$

которая изображена на рис. 6.2.

(**г**) Определить, до какой температуры ( $T_D$ ) могут быть охлаждены атомы с помощью такого метода. Оценить численную величину этой температуры  $T_D$ , известную как *доплеровский предел температуры*, для атомов натрия.

### Решение

Средний момент, доставляемый атомному облаку лазерными пучками, равен нулю, поэтому  $\langle \vec{p} \rangle$  остается постоянным. С другой стороны,  $\langle p^2 \rangle$  уменьшается по механизмам, которые мы обсуждали выше, но также и увеличивается вследствие

случайных толчков, обусловленных спонтанным излучением, и случайных актов поглощения. Мы найдем равновесное значение  $\langle p^2 \rangle$ , приравнявая скорости нагревающих и охлаждающих толчков.

Характерная скорость атомов дается выражением

$$\bar{v} = \frac{\sqrt{\langle p^2 \rangle}}{M}, \quad (6.16)$$

и тепловая энергия газа — выражением

$$E = \frac{k_B T}{2} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2M}, \quad (6.17)$$

где мы опять рассматриваем движение в одном измерении (переход к трем измерениям не приведет к существенным изменениям наших заключений).

Скорость изменения энергии  $E$  газа благодаря действию охлаждающей силы, описанной в п. (в), описывается выражением

$$\left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{\text{cool}} = \langle F \rangle \bar{v} \approx -2\hbar\omega^2 \kappa \frac{\bar{v}^2}{c^2}, \quad (6.18)$$

где мы использовали (6.15) в предположении, что  $\beta \ll 1$ , т. е.  $\omega\bar{v}/c \ll \gamma_0$ .

Теперь мы можем учесть нагрев газа, обусловленный стохастической природой эффекта отдачи при поглощении и излучении. В заданном цикле поглощения-излучения атом испытывает два случайных толчка величиной  $\hbar\omega/c$ . Частота таких толчков равна  $\approx \kappa\gamma_0$  (это следует из формулы (6.10), где мы опять используем приближение  $\beta \ll 1$  и учитываем, что мы имеем два лазерных пучка). Это — не что иное, как случайное блуждание в пространстве импульса, и мы можем написать

$$\left. \frac{\partial \langle p^2 \rangle}{\partial t} \right|_{\text{heat}} \approx 2\kappa\gamma_0 \frac{\hbar^2 \omega^2}{c^2}, \quad (6.19)$$

таким образом

$$\left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{\text{heat}} = \kappa\gamma_0 \frac{\hbar^2 \omega^2}{Mc^2}. \quad (6.20)$$

В равновесии

$$\left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{\text{cool}} + \left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{\text{heat}} = 0, \quad (6.21)$$

и из выражений (6.18) и (6.20) мы получаем

$$\frac{1}{2} M \bar{v}^2 = \frac{\hbar\gamma_0}{4}. \quad (6.22)$$

В результате, из выражений (6.18) и (6.22) мы имеем для равновесной температуры выражение

$$\boxed{T_D = \frac{\hbar\gamma_0}{2k_B}}, \quad (6.23)$$

известное как *доплеровский предел*. Для атомов натрия

$$T_D \approx 200 \text{ мК}. \quad (6.24)$$

Так выглядит предел охлаждения для двухуровневых атомов.

Интересно, что когда эксперименты с оптической мелассой были проведены впервые, наблюдались температуры на порядок величины более низкие. Физические механизмы, которые привели к такому субдоплеровскому охлаждению, связаны с тем фактом, что реальные атомы, использованные в экспериментах — не двухуровневые системы и, в действительности, обладают зеемановскими подуровнями и сверхтонкой структурой. Световые сдвиги и оптическая накачка по этим подуровням совместно приводят к эффектам типа *сизифова охлаждения*, которые позволяют достичь температур более низких, чем  $T_D$ . Эти явления описаны в статье [Cohen-Tannoudji и Phillips (1990)].

Экспериментаторы также пытались понять, как можно преодолеть температурный предел эффекта однофотонной отдачи, воспользовавшись зависящими от скорости темными состояниями [Aspect и др. (1988)], или используя зависящие от скорости рамановские переходы [Kasevich и Chu (1992)].

(д) Связать друг с другом три температурных масштаба:  $T_\gamma$ ,  $T^*$  и  $T_D$ .

### Решение

Сопоставляя выражения (6.3), (6.8) и (6.23), мы находим искомое соотношение:

$$T_D^2 = T^* T_\gamma. \quad (6.25)$$

## 6.2. Магнитооптические ловушки

Хотя «оптическая патока», описанная в задаче 6.1, реализует охлаждение атомов, она их не удерживает. Существует множество методов пространственной локализации атомов (см. [Metcalf и Van der Straten (1999)]), но наиболее широкое применение имеют магнитооптические ловушки (МОЛ), впервые предложенные [Pritchard и др. (1986)] и [Raab и др. (1987)]. Механизм захвата МОЛ аналогичен механизму оптической патоки — сила, действующая на атом в присутствии неоднородного магнитного поля, благодаря процессам рассеяния света, приобретает зависимость от координаты атома.

Рассмотрим одномерную МОЛ (рис. 6.3). Облако атомов освещается двумя встречными лазерными пучками, один из которых циркулярно поляризован по левому кругу ( $\sigma_+$ ), а второй — по правому ( $\sigma_-$ )<sup>1)</sup>. Пусть к атомам приложено неоднородное магнитное поле

$$\vec{B}(z) = \beta z \hat{z}. \quad (6.26)$$

Здесь  $\beta = dB/dz = \text{const}$ . Частота света отстроена на  $\gamma_0/2$  вниз от резонанса с переходом  $F_g = 0 \rightarrow F_e = 1$ , где  $\gamma_0$  — естественная ширина перехода, а  $g$  и  $e$  относятся к основному и возбужденному состоянию, соответственно. Будем считать, что доплеровская ширина много меньше естественной ширины линии атомного перехода<sup>2)</sup>.

<sup>1)</sup> Здесь циркулярные поляризации определяются по отношению к направлению  $+\hat{z}$ , не обязательно совпадающему с направлением распространения света.

<sup>2)</sup> Напомним, что речь идет о предварительно глубоко охлажденных атомах (Примечание редактора).

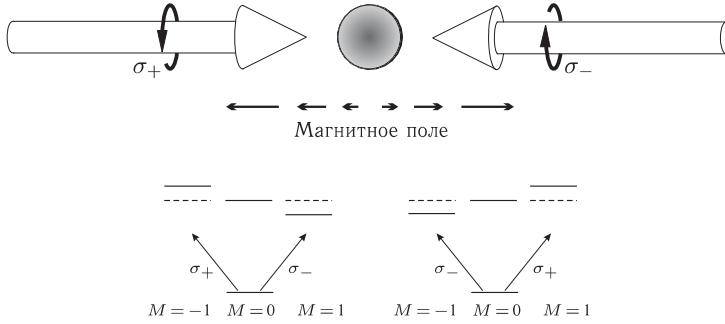


Рис. 6.3. Схематическое изображение одномерной магнитооптической ловушки. Поскольку неоднородное магнитное поле сдвигает зеемановские подуровни верхнего состояния, атомы слева от центра ловушки рассеивают больше фотонов лазерного пучка, распространяющегося направо, тогда как атомы справа от центра ловушки рассеивают больше фотонов лазерного пучка, распространяющегося налево. Это создает возвращающую силу, которая удерживает атомы вблизи центра ловушки. Поскольку лазерные пучки также создают оптическую патоку (задача 6.1), атомы к тому же и охлаждаются

**(а)** Рассчитать среднюю зависящую от координаты силу, действующую на атомы вследствие рассеяния света.

**(б)** Свет также охлаждает атомную систему по механизму, рассмотренному в задаче 6.1, поэтому уравнение движения холодных атомов в ловушке принимает форму уравнения затухающего гармонического осциллятора вблизи центра ловушки (доплеровский и зеемановский сдвиги малы по сравнению с естественной шириной линии  $\gamma_0$ ).

Найти частоту осцилляций и константу затухания вблизи центра 1D МОЛ. Для простоты будем считать, что параметр насыщения  $\kappa$  (задача 3.7) удовлетворяет неравенству  $\kappa \ll 1$ , хотя в типичных условиях работы МОЛ  $\kappa \lesssim 1$ . Дать численную оценку характерного времени затухания для типичного атома в градиенте магнитного поля 5 Гс/см.

### Решение

**(а)** Применяя тот же подход, который мы использовали в задаче 6.1 для вывода выражений (6.10), мы получаем выражение для скоростей рассеяния фотонов двух пучков

$$R_{\pm} = \frac{\kappa\gamma_0}{1 + [1 \pm 2g\mu_0 B/(\hbar\gamma_0)]^2}, \quad (6.27)$$

где  $g$  — фактор Ланде, а  $\pm$  относится к  $\sigma_{\pm}$  поляризованным световым пучкам (напомним, что мы установили отстройку  $\gamma_0/2$  от резонанса). Заметим, что все, что мы сделали для перехода от (6.10) к (6.27) — это заменили доплеровский сдвиг на зеемановский сдвиг. Поскольку каждый акт рассеяния придает атому, в среднем, дополнительный импульс  $\hbar\vec{k}$  (где  $\vec{k}$  — волновой вектор), мы имеем

$$\langle F \rangle = \hbar k(R_+ - R_-) = -4 \frac{\kappa\gamma_0 \hbar \omega}{c} \left[ \frac{2g\mu_0 B/(\hbar\gamma_0)}{4 + \left( \frac{2g\mu_0 B}{\hbar\gamma_0} \right)^4} \right]. \quad (6.28)$$

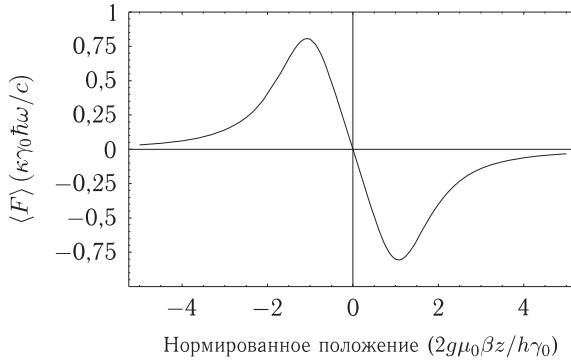


Рис. 6.4. Координатно-зависящая сила для одномерной магнитооптической ловушки

Поскольку  $B = \beta z$ , сила является координатно-зависящей; функция  $\langle F(z) \rangle$  графически изображена на рис. 6.4.

**(б)** Вблизи центра ловушки зеемановские сдвиги малы по сравнению с естественной шириной линии перехода, поэтому мы можем написать

$$\langle F(z) \rangle \approx -8 \frac{\kappa\omega}{c} g\mu_0 B(z) = -8 \frac{\kappa\omega}{c} g\mu_0 \beta z. \quad (6.29)$$

Кроме того, на атомы действует и охлаждающая сила (6.15), которая для достаточно медленных атомов описывается выражением

$$\langle F(v) \rangle \approx -8 \frac{\kappa\hbar\omega^2}{c^2} v. \quad (6.30)$$

Таким образом, уравнение движения атомов в 1D МОЛ имеет вид

$$M\ddot{z} = -8 \frac{\kappa\hbar\omega^2}{c^2} \dot{z} - 8 \kappa \frac{\omega}{c} g\mu_0 \beta z \quad (6.31)$$

и представляет собой уравнение затухающего гармонического осциллятора ( $M$  — масса атома). Таким образом, атомы в МОЛ пространственно локализуются и замедляются (охлаждаются) со временем. Частота осцилляций атомов в ловушке дается формулой

$$\omega_t^2 = 8\kappa \frac{\omega g\mu_0 \beta}{Mc}, \quad (6.32)$$

а константа затухания равна

$$\Gamma_t = 8\kappa \frac{\hbar\omega^2}{Mc^2}. \quad (6.33)$$

Чтобы определить, является ли гармонический осциллятор недоуспокоенным или переуспокоенным, мы сопоставим частоту осцилляций ловушки со скоростью затухания:

$$\frac{\omega_t^2}{\Gamma_t^2} = \frac{g\mu_0 \beta M c^3}{8\hbar^2 \omega^3 \kappa}, \quad (6.34)$$

что можно переписать в виде произведения некоторых смысловых множителей:

$$\frac{\omega_t^2}{\Gamma_t^2} = \left( \frac{1}{16\pi} \frac{1}{\kappa} \right) \left( \frac{g\mu_0\beta\lambda}{\hbar\omega} \right) \left( \frac{Mc^2}{\hbar\omega} \right), \quad (6.35)$$

где  $\lambda$  — длина световой волны.

Поскольку мы приняли, что параметр насыщения меньше единицы, мы можем заключить, что первый множитель  $(16\pi\kappa)^{-1} \lesssim 10^{-2}$ . Второй множитель в (6.35) — это отношение изменения зеемановского сдвига на длине световой волны,  $g\mu_0\beta\lambda$ , к энергии фотона  $\hbar\omega$ . Мы имеем  $\beta = 5$  Гс/см, и для оптического перехода  $\lambda = 5 \times 10^{-5}$  см, поэтому  $g\mu_0\beta\lambda/\hbar \sim 2\pi \times 1$  Гц. Частота фотона равна  $\omega \sim 2\pi \cdot 10^{15}$ , поэтому  $g\mu_0\beta\lambda/(\hbar\omega) \sim 10^{-15}$ . Третий множитель — это отношение энергии атома в покое к энергии фотона, величина которого  $Mc^2/(\hbar\omega) \sim 10^{11}$  при  $M = 100$  атомных единиц. Комбинируя эти множители, мы видим, что движение является сильно переуспokoенным, пока параметр  $\kappa$  не слишком мал:  $\omega_t/\Gamma_t \sim 10^{-6}\kappa^{-1}$ . Поскольку при типичных условиях работы МОЛ  $\kappa \sim 0,1-1$ , это заключение действительно справедливо.

Характерное время затухания МОЛ можно оценить следующим образом. Дифференциальное уравнение, управляющее движением атома в МОЛ, имеет вид

$$\ddot{z} + \Gamma_t \dot{z} + \omega_t^2 z = 0. \quad (6.36)$$

Естественно искать решение в виде:  $z(t) = z_0 e^{i\tilde{\omega}t}$ , где  $z_0$  — первоначальная координата атома, а  $\tilde{\omega}$  — комплексная величина. Подставляя это предположительное решение в (6.36) и решая относительно  $\tilde{\omega}$ , мы получаем

$$\tilde{\omega} = \frac{i\Gamma_t \pm \sqrt{4\omega_t^2 - \Gamma_t^2}}{2}. \quad (6.37)$$

В сильно переуспokoенном режиме  $\omega_t \ll \Gamma_t/2$ . Мы можем сделать оценку:

$$\tilde{\omega} \approx \frac{i\Gamma_t}{2} \left[ 1 \pm \left( 1 - 2\frac{\omega_t^2}{\Gamma_t^2} \right) \right]. \quad (6.38)$$

Таким образом,  $\tilde{\omega}$  — чисто мнимая величина. Допустим, что при  $t = 0$  атом смещен относительно центра ловушки и имеет нулевую начальную скорость. Тогда общее решение имеет вид

$$z(t) \approx z_0 \left( A e^{-\Gamma_t t} + B e^{-(\omega_t^2/\Gamma_t)t} \right), \quad (6.39)$$

и поскольку

$$\dot{z}(0) \approx -z_0 \left( A\Gamma_t + B\frac{\omega_t^2}{\Gamma_t} \right) = 0, \quad (6.40)$$

в движении атома к центру ловушки доминирует минимальная скорость, а именно:

$$z(t) \approx z_0 e^{-t/\tau}, \quad (6.41)$$

где

$$\boxed{\tau \sim \frac{\Gamma_t}{\omega_t^2} \sim \frac{\hbar\omega}{g\mu\beta} \sim 5 \text{ мс.}} \quad (6.42)$$



### 6.3. Зеемановский замедлитель

В эксперименте Лаборатории Беркли [Lu и др. (1994)] короткоживущие радиоактивные атомы  $^{21}\text{Na}$  (время полураспада 22,5 с) получались путем бомбардировки стабильных атомов магния пучком протонов в реакции  $^{24}\text{Mg} + p \rightarrow \alpha + ^{21}\text{Na}$ . Пучок протонов из ускорителя облучал керамический диск  $\text{MgO}$ , помещенный в печь с температурой около 500 °С. Образующиеся атомы  $^{21}\text{Na}$  диффундировали к поверхности диска и испарялись. Часть этих атомов затем охлаждалась и захватывалась магнитооптической ловушкой (задачи 6.1 и 6.2). Схема установки показана на рис. 6.5.

При движении атомов натрия к магнитооптической ловушке, их поперечные скорости снижаются с помощью лазерных пучков, работающих в режиме поперечного охлаждения. Затем атомы проходят расстояние 1,2 м в области, где они замедляются до практически нулевой продольной скорости за счет взаимодействия со встречным лазерным пучком прежде, чем происходит истинный захват атомов в ловушку. Именно эту область замедления мы будем рассматривать в этой задаче. Замедляющий лазерный пучок настраивается на частоту вблизи сверхтонкой компоненты  $F = 2 \rightarrow F' = 3$  перехода  $3\ ^2S_{1/2} \rightarrow 3\ ^2P_{3/2}$  (D2-линия,  $\lambda = 580$  нм, время жизни возбужденного состояния  $\tau = 16$  нс, ядерный спин  $I = 3/2$ ) и имеет  $\sigma_+$  поляризацию. Резонансная частота атомов пучка сдвинута за счет эффекта Доплера. По мере того как атомы замедляются, доплеровский сдвиг уменьшается. Чтобы удерживать атомы в резонансе с атомным пучком, используемым для их замедления, с помощью соленоида с неравномерной обмоткой создается пространственно меняющееся магнитное поле.

(а) Предполагая, что атомы всегда находятся в резонансе с замедляющим лазерным пучком, оценить время, необходимое для остановки атома в случае, если параметр насыщения  $\kappa = 1$  (см. задачу 3.7).

(б) Пусть для простоты все атомы имеют первоначально одну и ту же продольную скорость, соответствующую температуре печи. Лазер настроен на частоту, близкую к частоте резонанса в нулевом поле. Рассчитать зависимость величины магнитного поля, которое должно быть создано замедляющим соленоидом, от продольной координаты.

#### Решение

(а) Для данного случая параметр насыщения дается формулой

$$\kappa = \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{\gamma_0^2}, \quad (6.43)$$

где  $d$  — дипольный момент перехода,  $\mathcal{E}$  — электрическое поле световой волны, а  $\gamma_0$  — естественная ширина возбужденного состояния. Отсюда следует, что скорость накачки атомов из основного состояния в возбужденное,

$$\Gamma_{\text{нап}} \approx \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{\gamma_0}, \quad (6.44)$$

равна скорости спонтанного распада возбужденного состояния  $\gamma_0$ . Оптическая накачка на другие состояния не происходит, потому что это — замкнутый переход, и для этого перехода не существует темных состояний основных подуровней (см. задачу 3.9).

Средняя сила  $\langle F \rangle$ , действующая на атомы со стороны лазерного пучка, дается формулой

$$\langle F \rangle = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{\hbar k}{4\tau}, \quad (6.45)$$

где  $\hbar k$  — импульс поглощенного фотона, а  $\tau$  — время жизни верхнего состояния.

Выражение (6.45) можно понять следующим образом. При каждом акте поглощения атом испытывает скачок импульса в направлении распространения света. От спонтанного излучения атомам, в среднем, не передается никакого импульса, поскольку спонтанное испускание фотонов происходит (приблизительно) в случайных направлениях. В (6.45)  $\Delta t$  — это время одного цикла накачки и спонтанного испускания. Поскольку  $\kappa = 1$ , скорости спонтанного излучения, вынужденного излучения и поглощения равны друг другу ( $\approx \gamma_0$ ).

Поэтому мы можем сделать вывод, что на каждый цикл поглощения и излучения уходит время  $2\tau$ , и, приближенно, половина времени такого цикла уходит на спонтанное излучение (атому не передается никакого импульса при поглощении с последующим вынужденным излучением). Таким образом, эффективное время замедления атома на  $\hbar k/M$  составляет  $4\tau$ . Средняя сила при  $\lambda = 589$  нм и  $\tau = 16$  нс равна

$$\langle F \rangle \approx 2 \cdot 10^{-15} \frac{\text{г} \cdot \text{см}}{\text{с}^2} = 2 \cdot 10^{-15} \text{ дин.} \quad (6.46)$$

Чтобы определить время, в течение которого лазер должен действовать на атомы чтобы остановить их, мы должны знать их начальный импульс при выходе из печи.

Наиболее вероятная скорость атома, выходящего из печи, может быть определена следующим образом [Reif (1965)]. Рассмотрим группу атомов внутри печи со скоростями между  $v$  и  $v + \Delta v$ , движущуюся к выходному отверстию печи. Плотность атомов  $n(v)$  с такой скоростью дается распределением Максвелла–Больцмана

$$n(v) \propto e^{-mv^2/(2k_B T)} v^2 dv, \quad (6.47)$$

и поток  $\Phi(v)$  таких атомов, выходящих из печи, равен

$$\Phi(v) \propto n(v) A v, \quad (6.48)$$

где  $A$  — площадь отверстия. Таким образом, наиболее вероятная скорость  $\tilde{v}$  может быть найдена путем определения скорости, при которой поток  $\Phi(v)$  максимален:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial v} = 0 \quad (6.49)$$

при

$$\tilde{v} = \sqrt{\frac{3k_B T}{M}}, \quad (6.50)$$

где  $M$  — масса атома. Заметим, что эта величина отличается от наиболее вероятной скорости атома внутри печи, которая равна  $\sqrt{2k_B T/M}$ .

Из (6.50) мы можем найти наиболее вероятный начальный импульс  $p_0$  атома натрия:

$$p_0 = \sqrt{3k_B T M} \approx 3 \cdot 10^{-18} \text{ г} \cdot \frac{\text{см}}{\text{с}}, \quad (6.51)$$

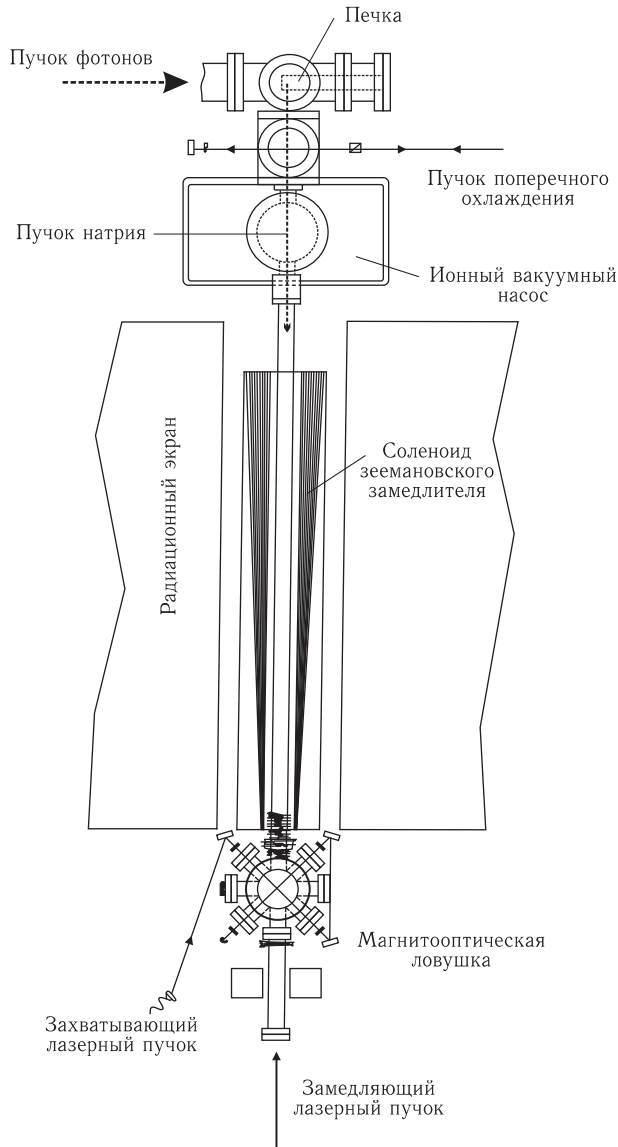


Рис. 6.5. Схема экспериментальной установки для захвата в ловушку и охлаждения радиоактивных атомов  $^{21}\text{Na}$  [Lu и др. (1994)]

что соответствует тепловой скорости  $\sim 10^5$  см/с. Время остановки дается отношением начального импульса к средней силе светового воздействия,

$$t_{\text{stop}} = \frac{p_0}{\langle F \rangle} \approx 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ с.} \quad (6.52)$$

В реальном эксперименте  $t_{\text{stop}} \approx 3 \cdot 10^{-3}$  с, что соответствует  $\kappa \approx 1/2$ .

(б) В этом пункте задачи мы считаем, что все атомы имеют одну и ту же начальную скорость и принимаем, что  $\kappa = 1$ . Мы также используем тот факт, что замкнутый, «заикленный» переход происходит между двумя «вытянутыми» состояниями сверхтонких уровней  $F = 2$  и  $F = 3$ , т.е.  $M_F = F$ , для которых зеемановские сдвиги такие же, как и для бесспиновых ядер (пренебрегая взаимодействием ядерных магнитных моментов с магнитным полем). Следовательно, мы, по сути, работаем с полным электронным угловым моментом  $J$ . Атомы всегда удерживаются в резонансе с помощью магнитного поля, так что они испытывают однородное замедление

$$a = \frac{\langle F \rangle}{M} = \frac{\hbar k}{4\tau M} \approx 6 \cdot 10^7 \frac{\text{см}}{\text{с}^2}. \quad (6.53)$$

Заметим, что это составляет  $\approx 6 \cdot 10^4 g$  (где  $g$  — ускорение свободного падения в земном поле), т.е. атомы вылетают из печи со сверхзвуковой скоростью и останавливаются, пройдя расстояние 1 м!

Частота световой волны сдвинута за счет эффекта Доплера на

$$\Delta\omega(z) = \omega \frac{v(z)}{c}, \quad (6.54)$$

где  $z$  — расстояние от ловушки и  $v(z)$  — скорость атомов в функции от расстояния. Скорость как функция расстояния выражается через замедление  $a$  так:

$$v(z) = \sqrt{2az}.$$

Чтобы удерживать атомы в резонансе, мы должны уравнивать зеемановское смещение, созданное магнитным полем, с доплеровским сдвигом  $\Delta\omega(z)$ .

При облучении  $\sigma_+$  светом атомы имеют тенденцию собираться на зеемановском подуровне  $M_J = 1/2$  основного состояния. Поскольку атомы испытывают много циклов накачки, для замедления атомного пучка существенное значение имеет разность энергий между состояниями  $3^2S_{1/2} \ M_J = 1/2$  и  $3^2P_{1/2} \ M_J = 3/2$ . Зеемановский сдвиг резонансной частоты для случая  $\sigma_+$  света имеет вид:

$$\Delta\omega = [g_e \cdot (3/2) - g_g \cdot (1/2)] \frac{\mu_0 B(z)}{\hbar}, \quad (6.55)$$

где  $g_e = 4/3$  и  $g_g = 2$  — факторы Ланде возбужденного и основного состояний (задача 2.4),  $\mu_0$  — магнетон Бора и  $B(z)$  — магнитное поле в функции от расстояния от ловушки. Уравнивая выражения (6.65) и (6.54), получаем:

$$B(z) = \frac{\hbar\omega_0\sqrt{2az}}{\mu_0 c}. \quad (6.56)$$

Численно результат имеет вид:

$$B(z) \approx \left( \frac{2\pi \times 5 \cdot 10^{14} \text{ Гц}}{2\pi \times 1.4 \cdot 10^6 \text{ Гц/Гс}} \frac{1}{3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}} \sqrt{10^8 \text{ см} \cdot \text{с}^{-2}} \right) \sqrt{z} \approx 120\sqrt{z} \text{ Гс}.$$

Здесь  $z$  — расстояние от ловушки в сантиметрах.

## 6.4. Бозе-эйнштейновская конденсация (У)

Захват атомов в ловушку и охлаждение атомов (см., например, задачи 6.1 и 6.2) проложили путь к наблюдению бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК) атомных газов [Anderson и др. (1995), Bredley и др. (1995), Devis и др. (1995)], которая пре-

вратилась в увлекательнейшую область исследований на границе между атомной физикой и физикой конденсированного состояния (в качестве обзоров см. Нобелевские лекции [Cornell и Wieman (2002)] и [Ketterle (2002)] и монографию [Pethick и Smith (2002)]). Ранее было признано, что явления сверхтекучести и сверхпроводимости имеют определенное отношение к БЭК, но, поскольку эти явления наблюдались в системах, в которых важную роль играло взаимодействие между составляющими эти системы частицами, представляло значительный интерес создать БЭК на основе «идеального газа».

Признаком БЭК является макроскопический уровень заполнения одного квантово-механического состояния, описывающего движение атомов. В атомном газе при комнатной температуре существует огромное число доступных квантово-механических состояний, так что даже вероятность того, что два атома окажутся в одном состоянии, является чрезвычайно малой. Однако с понижением температуры газа, число доступных состояний уменьшается до тех пор, пока при определенной, очень низкой температуре, называемой *температурой бозе-конденсации* ( $T_c$ ), значительная часть атомов-бозонов не займет нижайшее квантовое состояние. Интуитивно можно понять, что такой режим устанавливается, когда длина волны де Бройля  $\lambda_{dB}$  атома становится равной характерному расстоянию между атомами. При этих условиях доступное число квантово-механических состояний приблизительно равно числу атомов.

Это — качественно иное состояние газа: если в газе при комнатной температуре каждый атом характеризуется своим местоположением и импульсом, то в бозе-конденсате положение и импульс большого числа атомов описываются единой волновой функцией.

В этом разделе мы рассчитаем  $T_c$  для  $N$  невзаимодействующих атомов-бозонов с массой  $m_a$  в ящике объемом  $V$ . Мы будем считать, что газ находится в тепловом контакте с термостатом <sup>1)</sup>.

**(а)** Пользуясь простым представлением, что бозе-эйнштейновская конденсация происходит, когда характерное расстояние между атомами становится сопоставимым с их де-бройлевской длиной волны  $\lambda_{dB}$ , оценить температуру бозе-эйнштейновской конденсации  $T_c$ .

### Решение

Длина волны де Бройля дается выражением

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{m_a v}, \quad (6.57)$$

где  $v$  — скорость атома. Наиболее вероятная скорость частицы газа описывается формулой

$$\tilde{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m_a}}, \quad (6.58)$$

<sup>1)</sup> Важно отметить, что эти соображения модифицируются в присутствии потенциала ловушки, как это обычно бывает в экспериментах по БЭК.

где  $T$  — температура газа. Таким образом типичное значение  $\lambda_{\text{дБ}}$  для атомов газа в зависимости от температуры имеет вид

$$\lambda_{\text{дБ}} \approx \sqrt{\frac{2\pi^2 \hbar^2}{k_B m_a T}}. \quad (6.59)$$

Длина волны де Бройля равна расстоянию между атомами, когда

$$\lambda_{\text{дБ}} \approx \left(\frac{N}{V}\right)^{-1/3}. \quad (6.60)$$

Из выражений (6.59) и (6.60) мы получаем оценку для температуры бозе-эйнштейновской конденсации  $T_c$ :

$$T_c \approx \frac{2\pi^2 \hbar^2}{k_B m_a} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \quad (6.61)$$

**(б)** Приведенных соображений достаточно для того, чтобы получить основные зависимости для  $T_c$ , однако строгое рассмотрение, с одной стороны, представляется поучительным, а, с другой, дает более точное численное значение коэффициента, который окажется важным при решении задачи 6.5.

Прежде чем переходить к этим относительно сложным расчетам, очертим общую идею подхода. Мы исходим из предположения, что бозе-эйнштейновская конденсация происходит, когда значительная доля атомов заселяет нижайшее энергетическое состояние. Мы располагаем энергии  $\epsilon_i$ , которыми может обладать атом в ящике, в возрастающем порядке и для простоты принимаем, что все они различны:

$$0 = \epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3 < \dots$$

Прежде всего, найдем выражение для вероятности  $p(n_i)$  обнаружения  $n_i$  атомов в квантовом состоянии  $|i\rangle$  с энергией  $\epsilon_i$ . Как отмечалось во введении к этой задаче, для атомных газов при температуре, значительно превышающей температуру конденсации,  $p(n_i) \ll 1$  при  $n_i > 0$ . Полученное выражение можно использовать для определения температуры, при которой среднее число атомов в основном состоянии,  $\langle N_0 \rangle$ , становится большим. Мы увидим, что при температуре ниже  $T_c$   $\langle N_0 \rangle$  быстро растет с понижением температуры.

Одно из наиболее замечательных свойств БЭК, которое лучше всего проявляется при этом формальном подходе, состоит в том, что если в рассматриваемых условиях (при тепловом контакте с термостатом) к образцу добавляются атомы, то они присоединяются к фракции конденсата  $\langle N_0 \rangle$ . Это происходит оттого, что среднее число атомов в возбужденных состояниях  $\langle N^* \rangle$  определяется температурой газа — все остальные атомы должны занимать основное состояние. По этой причине химический потенциал  $\mu$ , который показывает, на сколько меняется энергия системы при изменении числа частиц, оказывается для БЭК близким к нулю. Этот результат можно противопоставить случаю газа при комнатной температуре, когда энергия линейно зависит от  $N$ .

Первый шаг состоит в том, чтобы найти выражение для  $p(n_i)$ . Поскольку имеет-ся  $N$  атомов с полной энергией  $E$ , на систему накладывается два ограничения:

$$\sum_{i=0}^{\infty} n_i = N, \quad (6.62)$$

и

$$E = \sum_{i=0}^{\infty} n_i \epsilon_i. \quad (6.63)$$

Используя эти ограничения, выразить вероятность  $p(n_i)$  того, что  $n_i$  атомов находятся на энергетическом уровне  $\epsilon_i$ , через  $\epsilon_i$ ,  $n_i$ , температуру  $T$ , химический потенциал  $\mu$  и соответствующие константы.

### Решение

Согласно законам статистической механики (см., например, [Reif (1965)]), вероятность  $p(n_i)$  пропорциональна числу микросостояний  $\Omega$  с  $n_i$  атомами в состоянии  $|i\rangle$ . Величина  $\Omega$  определяется числом доступных микросостояний  $\Omega_{\text{rest}}$  для других  $N - n_i$  атомов в остальной части системы, согласующимся с ограничениями (6.62) и (6.63):

$$p(n_i) \propto \Omega_{\text{rest}}(N - n_i, E - n_i \epsilon_i). \quad (6.64)$$

Здесь удобно использовать энтропию  $S = k_B \ln \Omega$ ,

$$k_B \ln p(n_i) = \text{const} + S_{\text{rest}}(N - n_i, E - n_i \epsilon_i). \quad (6.65)$$

$S$  — приблизительно полная энтропия системы  $S_{\text{rest}}$ , и можем разложить  $S$  в ряд по степеням  $N$  и  $E$ :

$$k_B \ln p(n_i) \approx \text{const} + S(N, E) - n_i \left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_E - n_i \epsilon_i \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_N, \quad (6.66)$$

где мы обоснованно пренебрегаем членами более высоких порядков ввиду того, что в общем случае  $N \gg n_i$  и  $E \gg n_i \epsilon_i$ . Теперь мы можем воспользоваться следующими термодинамическими соотношениями [Reif (1965)]:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_N = \frac{1}{T}, \quad (6.67)$$

и

$$\left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_E = -\frac{\mu}{T}, \quad (6.68)$$

где  $\mu$  — химический потенциал. Таким образом, подставляя выражения (6.67) и (6.68) в (6.66), мы находим

$$\boxed{p(n_i) \propto \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}, \quad (6.69)$$

где

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (6.70)$$

и

$$\lambda = e^{\mu/k_B T}. \quad (6.71)$$

Член  $S(N, E)$  вносит вклад только в нормировку, поскольку  $N$  и  $E$  — константы для всего газа.

Чтобы найти точное значение вероятности, мы должны ввести условие

$$\sum_{n_i=0}^{\infty} p(n_i) = 1 \quad (6.72)$$

и теперь определить нормирующий множитель для  $p(n_i, n_i \epsilon_i)$ . Можно заметить, что сумма  $z_i$  всех ненормированных вероятностей из выражения (6.69) представляет собой геометрический ряд

$$z_i = 1 + \lambda e^{-\beta \epsilon_i} + \lambda^2 e^{-2\beta \epsilon_i} + \dots = \frac{1}{1 - \lambda e^{-\beta \epsilon_i}}. \quad (6.73)$$

Таким образом, вероятность обнаружения  $n_i$  атомов в состоянии  $i$  равна

$$p(n_i) = \frac{\lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{z_i}. \quad (6.74)$$

**(в)** Пользуясь выражением (6.74), выразить среднее число атомов в основном состоянии  $\langle N_0 \rangle$  и в возбужденных состояниях  $\langle N^* \rangle$  через  $\lambda$  (выражение (6.71)) и сумму по  $z_i$ . Обратит внимание на поведение  $\langle N_0 \rangle$  при стремлении химического потенциала к нулю.

### Решение

Общее число атомов  $N$  равно сумме средних чисел атомов  $\langle n_i \rangle$  в каждом из состояний:

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} \langle n_i \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \left( \sum_{n_i} n_i p(n_i) \right), \quad (6.75)$$

где  $p(n_i)$  определяется выражением (6.74). Поскольку

$$\langle n_i \rangle = \sum_{n_i} n_i p(n_i) = \sum_{n_i} \frac{n_i \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{z_i} = \frac{\lambda}{z_i} \frac{\partial z_i}{\partial \lambda} = \lambda \frac{\partial (\ln z_i)}{\partial \lambda}, \quad (6.76)$$

то для полного числа атомов мы имеем

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda \frac{\partial (\ln z_i)}{\partial \lambda}. \quad (6.77)$$

Таким образом, среднее число атомов в основном состоянии дается выражением

$$\langle N_0 \rangle = \frac{\lambda}{1 - \lambda}, \quad (6.78)$$

а среднее число атомов в возбужденных состояниях выражением

$$\langle N^* \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda \frac{\partial (\ln z_i)}{\partial \lambda}. \quad (6.79)$$



Поскольку  $\langle N_0 \rangle \geq 0$ , химический потенциал  $\mu \leq 0$ . Легко видеть, что когда  $\mu \rightarrow 0$ , то  $\lambda \rightarrow 1$ , а  $\langle N_0 \rangle \rightarrow \infty$ . Этот результат не физичен, поскольку газ содержит только  $N$  атомов. Разрешение парадокса состоит в том, что при температуре, несколько превышающей  $T_c$ ,  $\lambda$  оказывается заметно меньше, чем единица, и почти все атомы находятся в возбужденных состояниях, т. е.  $\langle N^* \rangle = N$ . Однако для наших расчетов величина  $\lambda$  так близка к единице, что в (6.79) мы можем положить  $\lambda = 1$ . Тогда, если температура падает ниже  $T_c$ , атомы начинают накапливаться в основном состоянии. Мы можем найти формулу для  $\langle N^* \rangle$  как функцию  $T$  и затем сказать, что

$$\langle N_0 \rangle = N - \langle N^* \rangle. \quad (6.80)$$

Другими словами, величина  $\lambda$  всегда несколько меньше единицы, так что  $\langle N_0 \rangle \leq N$  (выражение (6.78)).

(г) Рассмотрим теперь вероятность  $p$  обнаружения всей системы в заданном микросостоянии. Величина  $p$ , определяющая совместную вероятность обнаружения  $n_0$  атомов в основном состоянии,  $n_1$  атомов в первом возбужденном состоянии и т. д., будет равна произведению всех отдельных вероятностей  $p(n_i)$ , даваемых выражением (6.74):

$$p = \prod_{i=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^{-\beta \epsilon_i})^{n_i}}{z_i}. \quad (6.81)$$

Нормирующий множитель в этом случае известен как *большая статистическая сумма*  $\mathcal{Z}$ :

$$\mathcal{Z} = \prod_i z_i = \prod_i \left( \frac{1}{1 - \lambda e^{-\beta \epsilon_i}} \right), \quad (6.82)$$

и является чрезвычайно полезной при расчетах различных термодинамических свойств системы [Reif (1965)]. Мы, в частности, будем использовать  $\mathcal{Z}$  при расчетах  $T_c$  и энтропии  $S$  БЭК.

Рассмотрим натуральный логарифм  $\mathcal{Z}$ :

$$\ln \mathcal{Z} = \sum_{i=0}^{\infty} \ln \frac{1}{1 - \lambda e^{-\beta \epsilon_i}}. \quad (6.83)$$

Связывая эту величину с полным числом атомов газа  $N$  и приравнивая ее  $\langle N^* \rangle$  при  $\lambda = 1$ , мы сможем определить условия бозе-эйнштейновской конденсации.

Найти связь между полным числом атомов газа  $N$  и  $\ln \mathcal{Z}$ .

### Решение

Пользуясь соотношениями (6.77) и (6.83), мы получаем выражение для полного числа атомов:

$$N = \lambda \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \lambda}. \quad (6.84)$$

(д) Если мы выделим член выражения (6.83), связанный с основным состоянием ( $\epsilon_0 = 0$ ), то получим

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \frac{1}{1 - \lambda} + \sum_{i=1}^{\infty} \ln \frac{1}{1 - \lambda e^{-\beta \epsilon_i}}. \quad (6.85)$$

Выразить второй член в выражении (6.85), соответствующий атомам, не находящимся в основном состоянии, через функцию  $F_k(\lambda)$ , где

$$F_k(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n^k}. \quad (6.86)$$

Численно эту функцию можно определить для различных значений  $k$  и  $\lambda$ . В частности, мы воспользуемся этой формулой, чтобы для  $\lambda = 1$  из соотношения (6.84) получить выражение для  $\langle N^* \rangle$  при температуре  $T_c$ .

### Решение

Напомним сначала, что (как легко видеть, например, из разложения Тейлора)

$$\ln \frac{1}{1 - x} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n}. \quad (6.87)$$

Перепишем второй член выражения (6.85) в виде

$$\sum_{i=1}^{\infty} \ln \frac{1}{1 - \lambda e^{-\beta \epsilon_i}} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n} e^{-n\beta \epsilon_i} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-n\beta \epsilon_i}. \quad (6.88)$$

Его величину можно оценить следующим образом. Для свободных атомов в ящике (при отсутствии внутренних степеней свободы) энергии отдельных частиц даются выражениями

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_a V^{2/3}} (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2), \quad (6.89)$$

где  $q_1$ ,  $q_2$  и  $q_3$  — квантовые числа, описывающие движение атомов в ящике (т.е. условие квантования состоит в том, что импульс в заданном направлении  $j$  задается соотношением  $p_j = \pi \hbar q_j / L$ , где  $L$  — длина стороны ящика). В этом случае сумма  $\sum_{i=1}^{\infty} e^{-n\beta \epsilon_i}$  превращается в тройную сумму:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-n\beta \epsilon_i} &= \sum_{q_1=1}^{\infty} \sum_{q_2=1}^{\infty} \sum_{q_3=1}^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_a V^{2/3}} (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2) \right] = \\ &= \left( \sum_{q_1=1}^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_a V^{2/3}} q_1^2 \right] \right) \left( \sum_{q_2=1}^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_a V^{2/3}} q_2^2 \right] \right) \times \\ &\quad \times \left( \sum_{q_3=1}^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_a V^{2/3}} q_3^2 \right] \right), \quad (6.90) \end{aligned}$$

которую можно непосредственно определить путем перехода к интегралу:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-n\beta\epsilon_i} &= \left( \sum_{q=1}^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2}{2m_a} \frac{\pi^2}{V^{2/3}} q^2 \right] \right)^3 = \\ &= \left( \int_0^{\infty} \exp \left[ -n\beta \frac{\hbar^2}{2m_a} \frac{\pi^2}{V^{2/3}} x^2 \right] dx \right)^3 = \frac{V}{n^{3/2}} \left( \frac{m_a k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (6.91)$$

Множитель

$$n_Q = \left( \frac{m_a k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sim \frac{1}{\lambda_{dB}^3} \quad (6.92)$$

называют квантовой концентрацией.

Из соотношений (6.95), (6.88) и (6.91) мы получаем следующее выражение для  $\ln \mathcal{Z}$ :

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \frac{1}{1-\lambda} + n_Q V F_{5/2}(\lambda), \quad (6.93)$$

где  $F_{5/2}(\lambda)$  задается формулой (6.86).

**(е)** Подставим теперь выражение для  $\ln \mathcal{Z}$  (6.93) в соотношение (6.84) чтобы получить формулу для полного числа атомов  $N$ . Полагая  $\langle N^* \rangle = N$  и  $T = T_c$ , при  $\lambda = 1$  определить температуру бозе-конденсации  $T_c$ . Можно воспользоваться приближенным равенством

$$F_{3/2}(1) \approx 2,612. \quad (6.94)$$

### Решение

Согласно соотношениям (6.93) и (6.84), при  $T = T_c$  мы имеем

$$N \approx n_Q V F_{3/2}(1) = \langle N^* \rangle. \quad (6.95)$$

Из (6.95) получаем  $T_c$ :

$$T_c = 3,31 \frac{\hbar^2}{m_a k_B} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (6.96)$$

Сравнивая выражение (6.96) с (6.61), мы видим, что точное значение точки бозе-конденсации отличается от нашей оценки приблизительно в 6 раз.

**(ж)** Вычислить  $T_c$  для свободного газа атомов натрия при плотности  $10^{12} \text{ см}^{-3}$ .

### Решение

Точное значение температуры бозе-эйнштейновской конденсации для свободного газа атомов натрия с плотностью  $10^{12} \text{ см}^{-3}$  равно

$$T_c = \frac{3,31 \cdot (6,6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{с})^2 \cdot (10^8 \text{ см}^{-2})}{(8,6 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К}) \cdot (23 \cdot 931 \cdot 10^6 \text{ эВ}) / (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})} = 7,1 \cdot 10^{-8} \text{ К}.$$

Эта температура, близкая к 100 нанокельвин, на порядок величины ниже однофотонного предела отдачи для лазерного охлаждения (задача 6.1). Чтобы заполнить

пробел между температурами, достижимыми при лазерном охлаждении, и температурами, требуемыми для образования БЭК, обычно используется техника *испарительного охлаждения* [Masuhara и др. (1988)]. Эта техника использует загрузку холодных атомов в магнитную ловушку и постепенное снижение глубины ловушки, так что наиболее высокоэнергетичные атомы уходят из ловушки, тогда как остальные термализуются при более низкой энергии.

(з) Рассчитать энтропию  $S$  бозе-газа при температуре ниже критической  $T_c$ . (Мы воспользуемся этой информацией для решения задачи 6.5).

### Подсказка

Чтобы вычислить энтропию  $S$  бозе-газа, можно начать с расчета удельной теплоемкости при постоянном объеме,

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (6.97)$$

где  $U$  — энергия, а  $T$  — температура БЭК. После получения  $C_V$  энтропия может быть рассчитана из термодинамического тождества

$$T dS = dU \quad (6.98)$$

и, следовательно, при постоянном объеме

$$S = \int_0^T \frac{C_V dT'}{T'}. \quad (6.99)$$

Энергия  $U$  термостата может быть рассчитана путем дифференцирования логарифма большой статистической суммы  $\mathcal{Z}$  (см. соотношения (6.82)–(6.93)) по  $\beta = 1/(k_B T)$ <sup>1)</sup>:

$$U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}. \quad (6.100)$$

### Решение

Большая статистическая сумма для бозе-газа дается выражением (6.93)

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \frac{1}{1-\lambda} + n_Q V F_{5/2}(\lambda),$$

---

<sup>1)</sup> Это соотношение может быть доказано следующим образом. Логарифм большой статистической суммы имеет вид

$$\ln \mathcal{Z} = \sum_i \ln z_i,$$

и, таким образом,

$$-\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} = -\sum_i \frac{\partial \ln z_i}{\partial \beta} = -\sum_i \frac{1}{z_i} \frac{\partial z_i}{\partial \beta}.$$

Из формулы (6.73) мы также имеем

$$\frac{\partial z_i}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n_i} \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i} = -\sum_{n_i} n_i \epsilon_i \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}.$$

Отсюда мы получаем

$$-\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} = \sum_i \sum_{n_i} n_i \frac{\lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{z_i} \epsilon_i = \sum_i \sum_{n_i} n_i p(n_i) \epsilon_i = \sum_i \langle n_i \rangle \epsilon_i = U.$$

для которой мы можем рассчитать энергию БЭК с помощью формулы (6.100):

$$U = \frac{3}{2} n_Q k_B T V F_{5/2}(\lambda). \quad (6.101)$$

Следовательно для удельной теплоемкости мы имеем:

$$C_V = \frac{3}{2} \frac{5}{2} n_Q k_B V F_{5/2}(\lambda) + \frac{3}{2} n_Q k_B T V \frac{\partial F_{5/2}(\lambda)}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial (k_B T)}. \quad (6.102)$$

Если газ находится при температуре бозе-эйнштейновской конденсации  $T_c$  или ниже ее, то  $\lambda \rightarrow 1$  и второй член в выражении (6.102) обращается в ноль, поскольку  $\lambda$  не зависит от температуры. Чтобы связать  $C_V$  с числом атомов  $N$ , мы должны вспомнить, что полное число атомов при  $T = T_c$  дается выражением

$$N \approx \langle N^* \rangle = n_Q(T_c) V F_{3/2}(1). \quad (6.103)$$

Подставляя этот результат в формулу (6.102), мы получаем

$$C_V = \frac{15}{4} \frac{F_{5/2}(1)}{F_{3/2}(1)} N k_B \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (6.104)$$

Таким образом, из формулы (6.99) для энтропии БЭК имеем:

$$\begin{aligned} S &= \int_0^T \frac{C_V dT'}{T'} = \\ &= \frac{15}{4} \frac{F_{5/2}(1)}{F_{3/2}(1)} N k_B \int_0^T \left( \frac{T'}{T_c} \right)^{3/2} dT' = \\ &= \frac{5}{2} \frac{F_{5/2}(1)}{F_{3/2}(1)} N k_B \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \end{aligned} \quad (6.105)$$

и, следовательно,

$$\boxed{S = 1,283 \cdot N \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}}. \quad (6.106)$$

Эту энтропию можно сопоставить с энтропией свободного газа. Энергию  $U$  классического газа можно получить из соотношений (6.101) и (6.95) (где мы не пользуемся приближением  $\lambda \rightarrow 1$ ):

$$U = \frac{3}{2} \frac{F_{5/2}(\lambda)}{F_{3/2}(\lambda)} \langle N^* \rangle k_B T. \quad (6.107)$$

В классическом пределе  $\lambda \ll 1$ , поэтому  $F_{5/2}(\lambda) \approx F_{3/2}(\lambda) \approx \lambda$  и  $\langle N^* \rangle = N$ . В результате мы получаем из (6.107) известную формулу

$$U = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (6.108)$$

Из (6.97) и (6.99) находим

$$dS = \frac{3}{2} N k_B \frac{dT}{T}, \quad (6.109)$$

что приводит к зависимости энтропии от  $T$  и  $N$ , существенно отличающейся от соответствующей зависимости для бозе-газа при температуре ниже  $T_c$  (выражение (6.106); заметим, что  $S$  зависит неявным образом от  $N$  через  $T_c$  в (6.106)).

## 6.5. Бозе-эйнштейновская конденсация в оптической решетке

Рассмотрим атомы-бозоны в трехмерной (3D) *оптической решетке*. Оптическая решетка — это атомная ловушка, образованная стоячей световой волной или, как в рассматриваемом случае, пересечением нескольких стоячих световых волн. Атомы локализируются в позициях решетки силой дипольного взаимодействия, возникающей вследствие динамических штарковских сдвигов, вызываемых электрическим полем световой волны (задача 2.7). Потенциал оптической решетки является пространственно периодическим, в двух измерениях он выглядит как упаковка для яиц (см. рис. 6.6; детальное рассмотрение оптических решеток можно найти, например, в [Guidoni и Verkerk (1999), Metcalf и Van der Straten (1999), Rolston (1998)]).

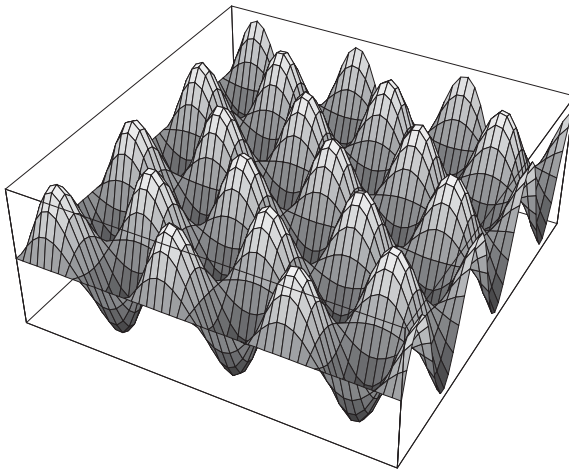


Рис. 6.6. Периодический потенциал двумерной оптической решетки

Допустим, что в каждой позиции решетки атомы охлаждены до нижайшего колебательного состояния и что на одну позицию приходится не больше одного атома (если больше одного атома попадает в одну ячейку, то с большой вероятностью один из атомов будет из нее выброшен). Решетки с числами заполнения  $\kappa$  (т.е. со средним числом атомов на ячейку), близкими к единице, могут быть реализованы экспериментально [DePui и др. (1999)].

Если при  $\kappa = 1$  адиабатически удалить решетку, постепенно снижая интенсивность световых полей (выполнение условий адиабатичности в этом случае оказывается делом довольно хитрым, но не будем на это обращать внимание!), ансамбль атомов превратится в бозе-эйнштейновский конденсат (БЭК) при нулевой температуре. На самом деле, по мере того как потенциальные ямы решетки становятся более мелкими, атомные волновые функции делокализируются, и, в конце концов, перекрываются (в этой точке атомы имеют существенно нулевой разброс импульсов).

Рассмотрим теперь случай  $\kappa < 1$ . Чему равно минимальное число заполнения  $\kappa_0$ , которое приведет к образованию БЭК? (Эта задача детально обсуждается в [Olshanii и Weiss (2002)].)

### Подсказка

Идея решения состоит в следующем. Если  $\kappa$  несколько меньше, чем единица, БЭК все же будет формироваться, но не все атомы окажутся в конденсированном состоянии, и температура будет конечной. Будет существовать критическое значение числа заполнения  $\kappa_0$ , при котором эта температура будет равна критической температуре БЭК  $T_c$ . При  $\kappa < \kappa_0$  никакого конденсата не образуется.

Если процесс является адиабатическим, то энтропия сохраняется. Чтобы найти  $\kappa_0$  нужно: **(а)** вычислить энтропию частично заполненной решетки, **(б)** вычислить энтропию бозе-газа при критической температуре и затем **(в)** согласовать полученные значения, чтобы найти  $\kappa_0$ .

### Решение

**(а)** Расчет энтропии для частично заполненной решетки сводится к простой комбинаторике. Пусть решетка содержит  $P \gg 1$  ячеек,  $\kappa P$  из которых являются занятыми. Число различных конфигураций таких решеток (т.е. число различных взаимных расположений пустых и занятых ячеек) равно

$$\Omega = \frac{P!}{(\kappa P)!(P - \kappa P)!}. \quad (6.110)$$

Выражение для энтропии имеет вид:

$$\begin{aligned} S &= k_B \cdot \ln(\Omega) = k_B \cdot \ln\left(\frac{P!}{(\kappa P)!(P - \kappa P)!}\right) = \\ &= k_B [\ln(P!) - \ln((\kappa P)!) - \ln((P - \kappa P)!)] \approx \\ &\approx k_B P[(\kappa - 1) \cdot \ln(1 - \kappa) - \kappa \cdot \ln(\kappa)]. \quad (6.111) \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались формулой Стирлинга для аппроксимации логарифмов факториалов ( $\ln P! \approx P \ln P - P$ ). Как и ожидалось, энтропия обращается в ноль при  $\kappa \rightarrow 0$  и при  $\kappa \rightarrow 1$  (для каждого из этих случаев существует только одна возможная конфигурация) и достигает максимума при  $\kappa = 1/2$  (рис. 6.7).

**(б)** Энтропия  $S$  БЭК дается выражением (6.106), где в нашем случае  $N = \kappa P$ :

$$S = 1,283 \cdot \kappa P \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}. \quad (6.112)$$

Энтропия линейно зависит от числа атомов и, соответственно, от  $\kappa$  (рис. 6.7).

**(в)** Зависимости энтропии свободного бозе-газа при  $T = T_c$  и оптической решетки от  $\kappa$  показаны на рис. 6.7. Условие образования БЭК состоит в том, что энтропия решетки меньше энтропии бозе-газа при  $T = T_c$ , что происходит при

$\kappa > \kappa_0 \approx 0,538.$

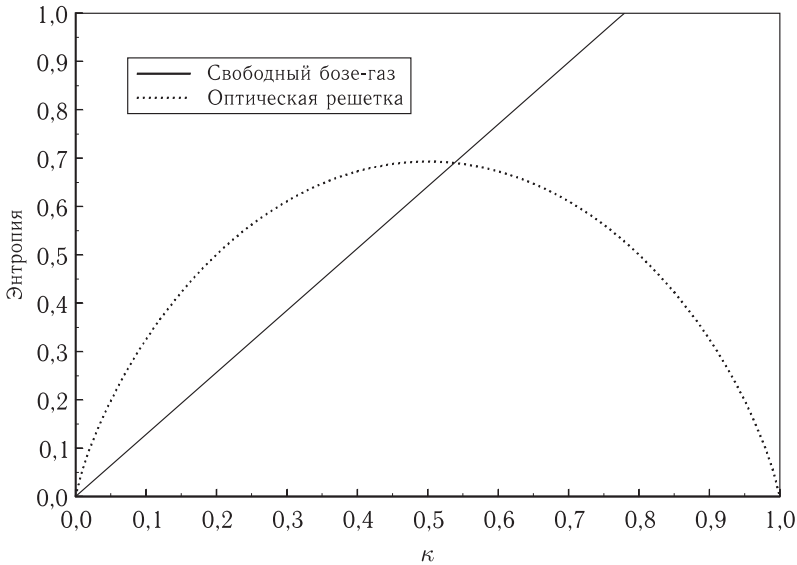


Рис. 6.7. Энтропия, приходящаяся на ячейку решетки (в единицах  $k_B$ ), как функция числа заполнения  $\kappa$  для свободного бозе-газа и для оптической решетки

## 6.6. Внутривибраторное охлаждение

В этой задаче мы проанализируем различные аспекты недавно предложенного метода охлаждения атомов, молекул и ионов через усиленное резонатором рассеяние (см. статью [Vuletic и Chu (2000)] и ссылки в ней).

**(а)** Рассмотрим сначала неподвижный атом, расположенный в стоячей волне на оси симметричного двухзеркального резонатора и определенным образом смещенный в продольном направлении относительно ближайшего узла поля. Резонатор возбуждается светом, который почти резонансен одной из мод резонатора (частоты  $\omega_c$ ). Частота возбуждающего света ( $\omega_L$ ) сильно отстроена от ближайшего атомного резонанса  $\omega_0$ , а его интенсивность достаточно слаба, чтобы не насытить оптический переход. Оценить изменение собственной частоты резонатора, обусловленное присутствием атома. Объяснить, как сдвиг зависит от положения атома по отношению к узлам и пучностям стоячей световой волны.

**(б)** Используя результат п. (а), показать, что если лазерная частота настроена (в пределах доли ширины резонатора  $\gamma_c$ ) на частоту ниже собственной частоты резонатора ( $\omega_L < \omega_c$ ), то мощность, циркулирующая в резонаторе, максимальна, когда атом располагается вблизи минимума механического потенциала, создаваемого на атоме благодаря его взаимодействию со светом.

**(в)** Допустим теперь, что  $\omega_c - \omega_L \approx \gamma_c$  и что атом движется вдоль оси резонатора со скоростью  $v \approx v^*$ , где  $kv^* \approx \gamma_c$ , т.е. за время релаксации резонатора  $1/\gamma_c$  атом перемещается на заметную долю длины волны света. Оценить среднюю мощность, забираемую от атома (эффект, приводящий к замедлению атома) и величину тормозящей силы. Что происходит при  $v \ll v^*$  и при  $v \gg v^*$ ?



### Подсказка

В этой задаче мы имеем один атом в объеме моды резонатора. Этот объем можно рассчитать, используя формулы для гауссова пучка, приведенные, например, в монографии [Siegmán (1986)]. Для случая TEM<sub>00</sub>-моды и симметричного резонатора длиной  $L$  с диаметром каустики (перетяжки) пучка  $w_0$  (в центре резонатора) имеем:

$$V_{\text{mode}} = \int_{-L/2}^{L/2} \pi w^2(z) dz, \quad (6.113)$$

где  $V_{\text{mode}}$  — объем моды;  $w^2(z) = w_0^2 \left[ 1 + (z/z_R)^2 \right]$ ,  $z$  — диаметр каустики на расстоянии  $z$  от центра резонатора;  $z_R = \pi w_0^2 / \lambda$  — размер *зоны Релея* и  $\lambda$  — длина световой волны. Прямые расчеты для симметричного резонатора (см. [Siegmán (1986), гл. 19] <sup>1)</sup>) дают

$$V_{\text{mode}} = \pi w_0^2 L + L^3 \lambda / 12 z_R. \quad (6.114)$$

Второй член этого выражения много меньше первого для резонаторов, длина которых не превышает удвоенной длины Релея (все конфигурации резонаторов от плоско-плоской до конфокальной этому требованию удовлетворяют). Поэтому в последующем рассмотрении мы этим членом в соотношении (6.114) пренебрежем.

### Решение

**(а)** В отсутствие насыщения влияние атома эквивалентно заполнению резонатора средой с эффективным показателем преломления  $n$  ( $|n - 1| \ll 1$ ). Изменение собственной частоты резонатора при этом дается выражением

$$\delta\omega_c = \omega_c \left( \frac{1}{n} - 1 \right) \approx \omega_c (1 - n). \quad (6.115)$$

Эффективный показатель преломления  $n$  можно связать с атомной поляризуемостью  $\alpha$  (задача 2.1), как это было сделано в задаче 4.2. Вид этой связи таков (формула (4.15)):

$$n - 1 \approx 2\pi N\alpha, \quad (6.116)$$

где  $N$  — плотность атомов в среде. При заданных условиях, когда расстройка  $|\omega_0 - \omega_L|$  значительно превышает ширину атомного перехода  $\gamma_0$ , мы получаем для поляризуемости (см. формулу (2.87) из задачи 2.7):

$$\alpha \approx \frac{d^2}{2\hbar(\omega_0 - \omega_L)}, \quad (6.117)$$

где  $d$  — дипольный момент перехода. Следовательно, для показателя преломления мы можем написать

$$n - 1 \approx \frac{\pi d^2 N}{\hbar(\omega_0 - \omega_L)}. \quad (6.118)$$

<sup>1)</sup> См., также, *Ананьев Ю. А.* Оптические резонаторы и лазерные пучки. М.: Наука, 1990. — *Примеч. ред.*

В нашем случае мы имеем один атом в объеме моды  $V_{\text{mode}} \approx \pi w_0^2 L$ , поэтому

$$N = \frac{1}{\pi w_0^2 L}. \quad (6.119)$$

Из выражений (6.118) и (6.115) получаем

$$\delta\omega_c = -\omega_c \frac{1}{w_0^2 L} \frac{d^2}{\hbar(\omega_0 - \omega_L)}. \quad (6.120)$$

Приведенные выше соображения никак не принимали во внимание тот факт, что свет в резонаторе представляет собой стоячую волну. Фактически, атом, расположенный в узле, «не видит» светового поля и, возможно, не может оказывать влияния на резонатор. С другой стороны, вблизи пучности атом видит максимальную амплитуду поля (вдвое большую амплитуды каждой из двух бегущих встречных волн, образующих стоячую волну в резонаторе), и таким образом его индуцированный дипольный момент оказывает максимальное влияние на поле в резонаторе. Чтобы представить эту связь в количественной форме, мы должны заметить, что, в общем случае, влияние среды на поле в резонаторе (на поглощение и на фазовый сдвиг) пропорционально произведению индуцированного дипольного момента на локальную амплитуду светового поля и, следовательно, квадратичным образом зависит от этой амплитуды. Таким образом, чтобы учесть роль положения атома в резонаторе, мы должны вместо уравнения (6.120) написать:

$$\delta\omega_c = -\omega_c \frac{1}{w_0^2 L} \frac{d^2}{\hbar(\omega_0 - \omega_L)} 2 \sin^2 k(z + L/2), \quad (6.121)$$

где  $k$  — волновой вектор световой волны, а  $z + L/2$  — расстояние до одного из зеркал. Соотношение (6.121) сводится к (6.120) при усреднении по положениям атома.

Заметим, что если входная частота отстроена в высокочастотную сторону от атомного резонанса ( $\omega_L > \omega_0$ ), то присутствие атома в резонаторе оттягивает собственную частоту резонатора в сторону высоких частот, т.е. уменьшает его эффективную длину. С другой стороны, если входная частота отстроена в низкочастотную сторону от атомного резонанса ( $\omega_L < \omega_0$ ), то присутствие атома в резонаторе оттягивает собственную частоту резонатора в сторону низких частот, увеличивая его эффективную длину.

**(6) Механический потенциал  $\Phi$  возникает вследствие динамического штарковского сдвига основного состояния атома (см., например, задачу 2.7):**

$$\Phi \approx \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{4\hbar(\omega_L - \omega_0)}, \quad (6.122)$$

где  $d$  — дипольный момент оптического перехода атома,

$$\mathcal{E} = 2\mathcal{E}_0 \cdot \sin k(z + L/2) \quad (6.123)$$

— амплитуда электрического поля световой волны в точке  $z$  резонатора, и  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда каждой из встречных волн, образующих стоячую волну.

Допустим сначала, что  $\omega_L > \omega_0$ . Согласно аргументу п. (а), присутствие атома вблизи гребня волны толкает собственную частоту резонатора в сторону высоких

частот, т.е. от  $\omega_L$ . Это снижает световую мощность, циркулирующую в резонаторе. С другой стороны, если атом находится вблизи узла, то циркулирующая в резонаторе мощность оказывается максимальной. В соответствии с формулой (6.122) узел в этом случае соответствует минимуму механического потенциала (поскольку светоиндуцированный сдвиг положителен). Таким образом, циркулирующая в резонаторе мощность максимальна, когда атом находится в минимуме механического потенциала  $\Phi$ .

Если  $\omega_L < \omega_0$ , присутствие атома в окрестности гребня стоячей волны сдвигает собственную частоту резонатора в сторону низких частот, т.е. по направлению к  $\omega_L$ . Это увеличивает световую мощность, циркулирующую в резонаторе. Таким образом, циркулирующая в резонаторе мощность максимальна, когда атом располагается на гребне стоячей волны. В соответствии с выражением (6.122), это соответствует минимуму механического потенциала (поскольку светоиндуцированный энергетический сдвиг отрицателен). Итак, как и раньше, циркулирующая в резонаторе мощность максимальна, когда атом находится в минимуме механического потенциала  $\Phi$ .

**(в)** Атом,двигающийся вдоль оси резонатора, испытывает постоянные подъемы и спуски по пикам рельефа механического потенциала  $\Phi$ , индуцированного световыми сдвигами (рис. 6.8). Происхождение тормозящей силы можно понять следующим

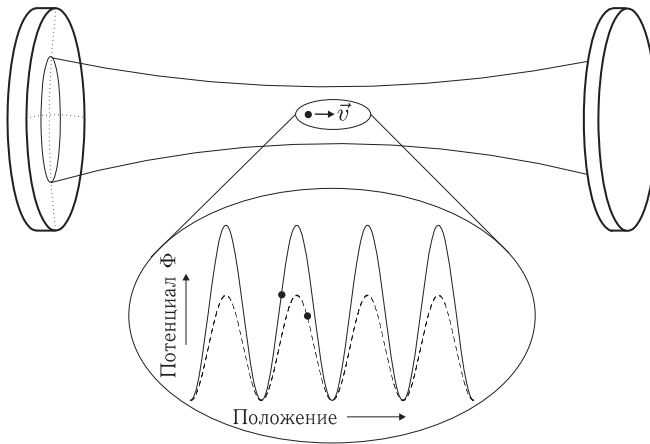


Рис. 6.8. Иллюстрация эффекта внутриврезонаторного охлаждения при  $\omega_L > \omega_0$  (заметим, что эта техника, как показано в п. (б), работает столь же успешно при  $\omega_L < \omega_0$ ). Атом движется со скоростью  $\vec{v}$  в механическом потенциале  $\Phi$ , создаваемом стоячими световыми волнами в оптическом резонаторе. Когда атом находится в узле электрического поля световой волны, он не оказывает никакого влияния на резонатор, и циркулирующая в резонаторе световая мощность (а, следовательно, и амплитуда  $\Phi$ ) при этом максимальна (сплошная линия на графике потенциала  $\Phi$ ). Когда атом располагается в пучности, показатель преломления меняется таким образом, что собственная частота резонатора уходит от частоты световой волны, тем самым снижая циркулирующую в резонаторе мощность и уменьшая амплитуду потенциала  $\Phi$  (штриховая линия). Отклик резонатора задерживается на характерное время  $\sim 1/\gamma_c$ , поэтому, когда атом движется вдоль оси резонатора, высота потенциального «холма», на который ему приходится забираться, всегда оказывается больше той, с которой он затем спускается. Следовательно, энергия передается от атома электромагнитному полю резонатора, и атом замедляется

образом. Если атом покоится в минимуме потенциала  $\Phi$ , то циркулирующая мощность и высота механического потенциала максимальны (как показано в п. (б)); для атома, покоящегося в максимуме потенциала  $\Phi$ , высота механического потенциала минимальна. Изменения механического потенциала происходят на характерных временах  $\sim \gamma_c^{-1}$ , так что когда атом движется из минимума потенциала  $\Phi$  в его максимум, высота потенциала оказывается больше, чем когда он движется из максимума  $\Phi$  в минимум. Чистый результат такого движения состоит в том, что высота «холма», на который взбирается атом, всегда оказывается больше высоты  $\Phi$  холма, с которого он спускается; в результате он замедляется [Vuletic и Chu (2000)].

Чтобы оценить тормозящую силу, оценим сначала вызванное присутствием атома изменение мощности в резонаторе и высоты механического потенциала. Циркулирующая в резонаторе мощность меняется от своей максимальной величины практически до нуля, когда резонатор перестраивается на  $\approx \gamma_c$  относительно частоты лазера. Когда лазер настроен на склон линии пропускания резонатора, мы имеем

$$\delta(\mathcal{E}^2) \approx (\mathcal{E}^2)_{\max} \frac{\delta\omega_c}{\gamma_c}. \quad (6.124)$$

Используя выражения (6.121) и (6.122), можно найти изменение высоты потенциала

$$\delta\Phi \approx \frac{2d^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2(\omega_L - \omega_0)^2} \frac{d^2}{w_0^2 L} \frac{\omega_c}{\gamma_c}. \quad (6.125)$$

Среднюю мощность  $P$ , отбираемую от атома, можно оценить, поделив изменение потенциала, определяемое формулой (6.125), на характерное время  $\gamma_c^{-1}$ :

$$P \approx \frac{2d^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2(\omega_L - \omega_0)^2} \frac{d^2}{w_0^2 L} \omega_c. \quad (6.126)$$

Хотя в это выражение явно не входит зависимость от  $\gamma_c$ , неявно эта зависимость присутствует через член  $\mathcal{E}_0^2$ .

Среднюю тормозящую силу  $F$  можно найти путем деления мощности на скорость атома (или, точнее, на ее проекцию на ось резонатора). Таким образом, циркулирующая в резонаторе мощность максимальна, когда атом находится в минимуме механического потенциала  $\Phi$ . Если  $v \ll v^*$ , тормозящая сила  $\propto v$ , так как за время релаксации резонатора  $1/\gamma_c$  атом успевает покрыть, соответственно, меньшее расстояние. При  $v \gg v^*$  сила спадает пропорционально  $\propto 1/v$ , поскольку атом движется по множеству минимумов и максимумов механического потенциала, и, в результате усреднения, эффект зануляется. Таким образом, общее выражение для охлаждающей силы, учитывающее эти факторы, имеет вид:

$$F \approx -\frac{2d^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2(\omega_L - \omega_0)^2} \frac{d^2}{w_0^2 L} \frac{\omega_c}{v^*} \frac{v/v^*}{1 + (v/v^*)^2}. \quad (6.127)$$

Эта оценка с точностью до численного множителя согласуется с результатами [Vuletic и Chu (2000)].

## 6.7. Внутриврезонаторное охлаждение многих частиц: стохастическое охлаждение

На основе результатов предыдущей задачи проанализировать процесс внутриврезонаторного охлаждения для практически важного случая  $K$  частиц ( $K \gg 1$ ), одновременно присутствующих в резонаторе<sup>1)</sup>. В частности, найти изменение среднеквадратичной скорости атомов за интервал  $\gamma_c^{-1}$ . Считать, что начальные скорости атомов удовлетворяют неравенству  $|v| \ll v^*$  (6.127). Какова оптимальная скорость охлаждения образца?

### Решение

Из второго закона Ньютона и из выражения для охлаждающей силы, полученного в предыдущей задаче для одиночного атома при  $|v| \ll v^*$  (формула (6.127)), мы получаем

$$\frac{dv}{dt} \approx -\xi \gamma_c v, \quad (6.128)$$

где

$$\xi \gamma_c \approx \frac{2d^2 E_0^2}{\hbar^2 (\omega_L - \omega_0)^2} \frac{d^2}{w_0^2 L} \frac{\omega_c}{M(v^*)^2}, \quad (6.129)$$

$M$  — масса атома, а  $\xi$  — безразмерный множитель.

Если в резонаторе содержится много атомов, то каждый из них, в соответствии с результатами предыдущей задачи, оказывает влияние на циркулирующее в резонаторе поле, и результирующее изменение механического потенциала воздействует не только на тот атом, который вызвал возмущение поля, но также и на другие атомы. Мы можем учесть этот факт следующим образом. Пусть в некоторый момент времени скорость  $i$ -го атома равна  $v_i$ . Спустя время  $\gamma_c^{-1}$  мы имеем

$$v'_i = v_i - \xi \left( v_i + \sum_{j \neq i} v_j \cos(\theta_{ij}) \right). \quad (6.130)$$

Здесь мы ввели множитель  $\cos(\theta_{ij})$ , чтобы учесть тот факт, что влияние  $j$ -го атома на поле в резонаторе может приводить либо к ускорению, либо к замедлению  $i$ -го атома, в зависимости от относительной фазы движения двух атомов по отношению к стоячей световой волне.

В качестве следующего шага вычислим квадрат  $v'_i$  и усредним его по всем атомам в резонаторе. (Мы работаем с квадратом скорости по той причине, что средняя скорость равна нулю.) Из выражения (6.130) мы получаем

$$\begin{aligned} (v'_i)^2 &= (v_i)^2 - 2v_i \xi \left( v_i + \sum_{j \neq i} v_j \cos(\theta_{ij}) \right) + \\ &+ \xi^2 \left[ v_i^2 + \left( \sum_{j \neq i} v_j \cos(\theta_{ij}) \right)^2 + 2v_i \sum_{j \neq i} v_j \cos(\theta_{ij}) \right]. \end{aligned} \quad (6.131)$$

<sup>1)</sup> Эта задача была порождена дискуссиями с М. Золотаревым.

Усреднение по ансамблю приводит к выражению (при  $K \gg 1$ ):

$$\overline{(v')^2} = \overline{v^2} - 2\xi\overline{v^2} + \frac{\xi^2 K}{2} \overline{v^2}. \quad (6.132)$$

Второй член правой части выражения (6.132) описывает охлаждение одиночного атома, а третий член отвечает коллективному нагреванию.

Величина  $\xi$  пропорциональна интенсивности света в резонаторе. В то время как для случая одного атома скорость охлаждения линейно зависит от  $\xi$ , для случая многих атомов это не так. Из выражения (6.132) видно, что при  $\xi > 4/K$  в целом наблюдается нагревание, а не охлаждение. Оптимальная скорость охлаждения соответствует  $\xi_{opt} = 2/K$ . Подставляя эти результаты в (6.132) и вспоминая определение  $\xi$ , мы находим, что

$$\text{оптимальная скорость охлаждения} = \frac{2\gamma_c}{K}, \quad (6.133)$$

что можно рассматривать как предел, накладываемый на охлаждение больших ансамблей атомов.

Заметим, что приведенное обсуждение имеет прямое отношение к *стохастическому охлаждению* заряженных частиц в ускорителях и ионных ловушках [Ghosh (1995), Beverini и др. (1988)]. При стохастическом охлаждении среднее смещение частиц определяется путем измерения индуцированного заряда на электроде. Этот сигнал затем усиливается и подается, с соответствующей фазой, на другой электрод, корректирующий среднее смещение. Здесь оптимальная скорость охлаждения также ограничивается числом частиц. В схеме внутрирезонаторного охлаждения механизм обратной связи не является внешним, как в случае обычного стохастического охлаждения, а определяется динамикой взаимодействия атома с резонатором [Gangl и Ritsch (2000)].

Последние эксперименты [Chap и др. (2003)] показали, что наряду с эффектами, рассмотренными выше, существенную или даже определяющую роль для ансамбля большого числа атомов ( $K \sim 10^6$  в работе [Chap и др. (2003)]) могут играть силы охлаждения, возникающие вследствие коллективного излучения в моду резонатора. Рассмотрение таких эффектов мы оставляем в качестве упражнения для читателей.

## 6.8. Энергия Ферми для гармонической ловушки

Наряду с созданием вырожденного бозе-газа, рассмотренным в задачах 6.4 и 6.5, для получения ультрахолодных газов фермионов могут использоваться методы захвата атомов в ловушки и охлаждения атомов [DeMarco и Jin (1999)]. Поведение вырожденного ферми-газа существенным образом отличается от поведения вырожденного бозе-газа — вместо конденсации большого числа атомов в основном состоянии атомной ловушки, как это происходит с бозонами при очень низкой температуре, только один ферми-атом может занимать данное квантовое состояние. Много замечательных квантовых статистических явлений, связанных с ферми-вырождением, может быть исследовано в условиях контроля за внешним окружением атомной ловушки. К ним, например, относятся: изменение характера атомных столкновений [DeMarco и др. (2001)], низкотемпературный фазовый переход в сверхтекучее состояние куперовских пар [O'Hara и др. (2002), Weiping и др. (1999)], структура электронных оболочек [Schneider и Wallis (1998), Bruun и Burnett (1998)], и т. д.

В этой задаче мы найдем энергии Ферми для атомного газа, заключенного в гармоническом потенциале ловушки.

**(а)** Показать, что энергия Ферми  $N$  идентичных частиц ( $N \gg 1$ ) с полуцелым спином в одном спиновом состоянии с массой  $m$ , захваченных изотропным трехмерным гармоническим потенциалом

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2), \quad (6.134)$$

дается выражением

$$E_F \approx \hbar\omega(6N)^{1/3}. \quad (6.135)$$

Принять, что  $E_F \gg \hbar\omega$ .

**(б)** Оценить температуру Ферми для  $N = 10^6$  атомов и  $\omega = 2\pi \times 40$  Гц.

**(в)** Чему равна энергия Ферми для анизотропной ловушки с

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m\omega^2 [(ax)^2 + y^2 + z^2] ? \quad (6.136)$$

Принять, что  $E_F \gg \hbar\omega$ ,  $a\hbar\omega$

### Решение

**(а)** Будем измерять энергии атомов  $E$  в единицах  $\hbar\omega$ . Выберем некоторое целое число  $E \gg 1$ . (Здесь мы устанавливаем ноль энергии на уровне энергии нулевых колебаний. Это — хорошее приближение, поскольку нас интересуют главным образом высокие уровни возбуждения, так как  $N \gg 1$ .) Вопрос состоит в следующем: сколько *различных* комбинаций квантовых чисел  $n_x$ ,  $n_y$  и  $n_z$  дают одну и ту же полную энергию  $E$ ? Это число скажет нам, сколько ферми-атомов могут занимать состояние с энергией  $E$ .

Чтобы ответить на этот вопрос, мы можем непосредственно подсчитать число возможных комбинаций:

$n_x$	$n_y$	$n_z$	Число состояний
$E$	0	0	1
$E-1$	1	0	2
$E-1$	0	1	
$E-2$	2	0	3
$E-2$	1	1	
$E-2$	0	2	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Мы видим, что число комбинаций, дающих полную энергию  $E$ , равно

$$n(E) = \sum_{i=0}^E (i+1) = \frac{E+2}{2} (E+1) \approx \frac{E^2}{2}. \quad (6.137)$$

Чтобы найти энергию Ферми, следует просуммировать число возможных состояний для всех энергий  $E \leq E_F$  (используя (1.26)):

$$n(E \leq E_F) = \sum_{E=1}^{E_F} n(E) \approx \frac{1}{2} \sum_{E=1}^{E_F} E^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{E_F(1 + E_F)(1 + 2E_F)}{6} \approx \frac{E_F^3}{6} \quad (6.138)$$

и приравнять полученное значение  $N$ . В результате получаем искомое соотношение (6.135).

**(б)** Температура Ферми дается выражением

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} \omega (6N)^{1/3}. \quad (6.139)$$

Используя соотношения Приложения А, мы можем выразить множитель  $\hbar/k_B$  следующим образом:

$$\frac{\hbar}{k_B} = \frac{\hbar c}{k_B c} \approx \frac{(200 \text{ эВ} \cdot \text{нм})(11\,600 \text{ К/эВ})}{3 \cdot 10^{17} \text{ нм/с}} = 8 \cdot 10^{-12} \text{ К} \cdot \text{с}, \quad (6.140)$$

что дает

$$\boxed{T_F \approx 400 \text{ нК.}} \quad (6.141)$$

В эксперименте [DeMarco и Jin (1999)] для достижения  $T_F$  использовались методы лазерного охлаждения, совместное охлаждение с бозонными частицами и метод испарительного охлаждения.

**(в)** Замечая, что в энергии возбуждения вдоль оси  $x$  величина  $\hbar\omega n_x$  заменяется на  $a\hbar\omega n_x$ , мы можем повторить вычисления, сделанные в п. (а):

$$\boxed{E_F = \hbar\omega(6Na)^{1/3}.} \quad (6.142)$$



## Глава 7

# МОЛЕКУЛЫ

### 7.1. Амплитуда молекулярных колебаний

Оценить среднеквадратичную величину  $\delta r = r - r_e$ , где  $r$  — межъядерное расстояние, а  $r_e$  — его равновесное значение, для двухатомной молекулы в нижнем колебательном состоянии.

#### Подсказка

Равновесное расстояние между ядрами в типичной двухатомной молекуле по порядку величины равно нескольким радиусам Бора,  $r_e \sim 4a_0$ , а энергия  $D_0$  диссоциации<sup>1)</sup> по порядку величины равна

$$D_0 \sim hc \frac{R_\infty}{5} \sim \frac{1}{10} \frac{e^2}{a_0}, \quad (7.1)$$

где  $R_\infty$  — постоянная Ридберга. Чтобы оценить среднеквадратичное значение  $\delta r$ , предположим, что когда  $\delta r \approx a_0$ , потенциальная энергия равна нулю. Иными словами, уровень диссоциации достигается, когда химическая связь растягивается на величину, сопоставимую с ее длиной. Эти наблюдения достаточны для того, чтобы провести требуемые оценки.

#### Решение

Представляя себе молекулу в виде двух масс, связанных «пружиной», мы можем воспользоваться выражением

$$k \frac{a_0^2}{2} \sim hc \frac{R_\infty}{5} \quad (7.2)$$

чтобы оценить константу упругости пружины  $k$ :

$$k \sim \frac{2hcR_\infty}{5a_0^2} \sim \frac{e^2}{5a_0^3}. \quad (7.3)$$

---

<sup>1)</sup> Энергия диссоциации определяется как разность энергий между основным состоянием молекулы и началом континуума (минимальной энергией несвязанных атомов). Это — работа, которую нужно совершить, чтобы диссоциировать молекулу, находящуюся в основном состоянии.

Отсюда мы получаем известную оценку для частоты молекулярных колебаний:

$$\omega_{\text{vib}} \sim \sqrt{\frac{k}{\mu}} \sim \sqrt{\frac{e^2}{5a_0^3\mu}} \sim \frac{1}{\hbar} \frac{e^2}{2a_0} \sqrt{\frac{m}{\mu}} \sim 2\pi c R_\infty \sqrt{\frac{m}{\mu}}, \quad (7.4)$$

где  $m$  — масса электрона, а  $\mu$  — приведенная масса двух атомов.

Если молекула находится в нижнем колебательном состоянии, то энергия колебаний составляет  $\sim \hbar\omega_{\text{vib}}$ . С другой стороны, эту энергию можно оценить как  $\sim k(\delta r)^2$ . Комбинируя эти две оценки, мы получаем:

$$(\delta r)^2 \sim \frac{5}{2} a_0^2 \sqrt{\frac{m}{\mu}} \quad (7.5)$$

или

$$\boxed{\delta r \sim a_0 \left(\frac{m}{\mu}\right)^{1/4}}, \quad (7.6)$$

что составляет  $\sim 0,1a_0$  при  $\mu \sim 5$  а.е.

Заметим, что практически те же оценки применимы к атомным колебаниям в кристаллической решетке твердого тела при низких температурах ( $k_B T \ll \hbar\omega$ ). Аналогичный подход можно применить и для оценки среднеквадратичной амплитуды колебаний (и для молекул, и для твердых тел) при более высоких температурах.

## 7.2. Колебательные постоянные для потенциала Морзе

Межатомный потенциал для двухатомной молекулы часто параметризуют с помощью потенциала Морзе

$$V(r) = D_e (1 - e^{-\beta(r-r_e)})^2, \quad (7.7)$$

схематически изображенного на рис. 7.1. Здесь  $r_e$  — равновесное межъядерное расстояние, а  $D_e$  и  $\beta$  — параметры, характеризующие потенциал данной системы<sup>1)</sup>.

Выразить колебательные постоянные двухатомной молекулы  $\omega_e$  и  $\omega_e x_e$  через параметры потенциала Морзе и приведенную массу  $\mu$ . При этом энергии колебательных состояний определяются выражением [Herzberg (1989)]:

$$G(\nu) = \omega_e \left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots, \quad (7.8)$$

<sup>1)</sup> Отметим различие между потенциалом ионизации  $D_0$ , введенным в задаче 7.1, и введенной здесь величиной  $D_e$ . Константа  $D_e$ , как можно видеть из рис. 7.1, это разность энергий дна потенциальной ямы и континуума, а  $D_0$  — разница энергий основного состояния молекулы и континуума. Таким образом, они приблизительно различаются на энергию нулевых колебаний:

$$D_e - D_0 \approx \frac{\omega_e}{2}.$$

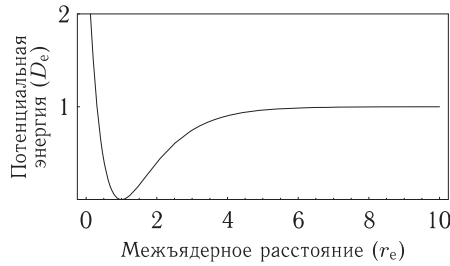


Рис. 7.1. Потенциал Морзе при  $\beta = 1$ . Межъядерное состояние выражено в единицах его равновесной величины  $r_e$ ; энергия выражается в единицах энергии диссоциации  $D_e$

где  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  — колебательное квантовое число, член  $\omega_e$  описывает эквидистантные уровни гармонического осциллятора, а член  $\omega_e x_e$  учитывает ангармоничность<sup>1)</sup>,<sup>2)</sup>.

### Подсказка

Чтобы найти ангармоничность, можно воспользоваться тем фактом, что расстояние между ближайшими колебательными уровнями стремится к нулю по мере того, как энергия колебаний приближается к энергии диссоциации  $D_0$ .

### Решение

Разлагая потенциал Морзе (выражение (7.7)) вблизи  $r = r_e$ , мы получаем

$$V(r) \approx D_e \beta^2 (r - r_e)^2, \quad (7.9)$$

что представляет собой гармонический потенциал. Хорошо известно, что частота квантово-механического гармонического осциллятора равна частоте классического осциллятора  $\sqrt{k/\mu}$ , где  $k$  — константа упругости «пружины», которая, как следует из выражения

$$\frac{k(r - r_e)^2}{2} = D_e \beta^2 (r - r_e)^2, \quad (7.10)$$

равна  $k = 2D_e \beta^2$ , что дает

$$\omega_e = \beta \sqrt{\frac{2D_e}{\mu}}. \quad (7.11)$$

Чтобы найти  $\omega_e x_e$ , мы замечаем, что, как видно из формулы (7.8), разность энергий между смежными колебательными уровнями уменьшается линейно с  $\nu$ :

$$\Delta G(\nu) = G(\nu + 1) - G(\nu) = \omega_e - 2\omega_e x_e(\nu + 1). \quad (7.12)$$

<sup>1)</sup> В таблицах молекулярных констант величины  $\omega_e$  и  $\omega_e x_e$  приводятся в единицах энергии, в качестве которых часто используются волновые числа (в  $\text{см}^{-1}$ ). Множители преобразования различных единиц друг в друга приведены в Приложении А. Здесь мы полагаем  $\hbar = 1$ , и поэтому единицы измерения энергии и частоты совпадают.

<sup>2)</sup> В то время как выражение (7.8) представляет общее разложение для ангармонического осциллятора, оказывается, что для случая потенциала Морзе никаких членов высших порядков не возникает (см., например, [Herzberg (1989), гл. III]).

Как было указано в подсказке, расстояние между соседними колебательными уровнями стремится к нулю по мере того как их энергия стремится к  $D_e$ . Мы можем использовать этот факт для того, чтобы связать ангармоничность  $\omega_e x_e$  с параметрами потенциала Морзе. Мы видим, что максимальное значение колебательного квантового числа, определенного соотношением  $\Delta G(\nu_{\max})=0$ , равно

$$\nu_{\max} = \frac{\omega_e}{2\omega_e x_e} - 1 \approx \frac{\omega_e}{2\omega_e x_e}. \quad (7.13)$$

Энергия соответствующего состояния может быть найдена путем добавления последовательных энергетических расхождений выражения (7.12):

$$G(\nu_{\max}) = \frac{\omega_e}{2} + \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}} \Delta G(\nu) \approx \nu_{\max} \omega_e - \omega_e x_e \nu_{\max}^2. \quad (7.14)$$

Приравнявая эту энергию  $D_e$ , мы получаем

$$\omega_e x_e \approx \frac{\omega_e^2}{4D_e} = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2\mu}. \quad (7.15)$$

### 7.3. Центробежное растяжение

Если двухатомная молекула вращается, результирующая центробежная сила растягивает ядра (этот эффект известен как *центробежное растяжение*). Определить, как меняется равновесное межъядерное расстояние в функции вращательного квантового числа  $J$  для нижних колебательных состояний.

Показать, что это изменение расстояния между ядрами приводит к появлению нового члена энергии молекулы вида

$$\Delta E = -D J^2 (J+1)^2, \quad (7.16)$$

где

$$D = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2}. \quad (7.17)$$

Здесь

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} \quad (7.18)$$

— *вращательная постоянная*, а  $\omega_e$  — *колебательная постоянная*.

#### Решение

В задаче 7.2 мы рассматривали межатомный потенциал  $V(r)$ , связанный с распределением заряда, но не принимали во внимание энергию, обусловленную вращательным движением  $V_R(r)$ . Классически, вращательная энергия  $V_R$  определяется отношением квадрата углового момента  $\mathcal{L}$  к удвоенному моменту инерции  $I_0$ :

$$V_R = \frac{\mathcal{L}^2}{2I_0}. \quad (7.19)$$

Для двухатомной молекулы момент инерции определяется формулой  $I_0 = \mu r^2$ , где  $\mu$  — приведенная масса, а квантово-механическое выражение для квадрата углового момента имеет вид  $\mathcal{L}^2 = \hbar^2 \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1)$ .

В результате мы имеем

$$V_R(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1). \quad (7.20)$$

Эта вращательная энергия может быть включена в эффективный потенциал  $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + V_R(r)$ . Для низколежащих уровней энергии мы можем разложить эффективный потенциал в окрестности его минимума (в окрестности  $r_0$ ) (точно так же, как мы делали это для  $V(r)$  в задаче 7.2, чтобы получить формулу (7.9)):

$$V_{\text{eff}}(r) \approx \frac{k}{2} (r - r_0)^2. \quad (7.21)$$

Таким образом, как и раньше, мы можем моделировать двухатомную молекулу двумя ядрами, связанными пружиной с константой упругости  $k$ . В первом порядке вращательное движение действует на  $r_0$ , но не оказывает влияния на константу упругости  $k$ .

Чтобы найти зависимость равновесного расстояния  $r_0$  от  $\mathcal{J}$ , мы берем производную от  $V_{\text{eff}}(r)$  и оцениваем ее величину при  $r = r_e$ :

$$k(r_e - r_0) = \left. \frac{dV}{dr} \right|_{r_e} - \frac{\hbar^2}{\mu r_e^3} \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1). \quad (7.22)$$

Поскольку для межатомного потенциала  $V(r)$

$$\left. \frac{dV}{dr} \right|_{r_e} = 0, \quad (7.23)$$

мы можем решить (7.22) относительно  $r_0$ :

$$r_0 = r_e + \frac{\hbar^2}{\mu k} \frac{\mathcal{J}(\mathcal{J} + 1)}{r_e^3}. \quad (7.24)$$

Таким образом мы видим, что, действительно, центробежная сила стремится растянуть молекулу. Можно заменить константу упругости пружины колебательной постоянной  $\omega_e$  (выраженной в энергетических единицах) с помощью соотношения  $k = \mu \omega_e^2 / \hbar^2$  (см. выражение (7.8)). В этом случае мы получаем

$$r_0 = r_e + \frac{\hbar^4}{2\mu^2} \frac{\mathcal{J}(\mathcal{J} + 1)}{\omega_e^2 r_e^3}. \quad (7.25)$$

В пренебрежении центробежным растяжением энергия вращения  $E_R$  двухатомной молекулы определяется выражением

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1) = B_e \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1). \quad (7.26)$$

При учете центробежного растяжения мы заменяем в выражении (7.26)  $r_e$  на  $r_0$ . Первый порядок разложения в ряд Тейлора дает

$$E'_R = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1) \approx B_e \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1) - \frac{\hbar^6}{2\mu^3 r_e^6 \omega_e^2} \mathcal{J}^2(\mathcal{J} + 1)^2. \quad (7.27)$$

Таким образом, мы действительно находим что центробежное растяжение меняет энергию молекулы на величину

$$\Delta E \approx -D \mathcal{J}^2(\mathcal{J} + 1)^2, \quad (7.28)$$

где постоянная  $D$  дается формулой (7.17).

## 7.4. Относительные плотности атомов и молекул в газовой фазе

В этой задаче мы рассмотрим общий вопрос спектроскопии, касающийся относительного содержания различных компонент в условиях равновесия в насыщенных парах. Например, в различных экспериментах может оказаться желательным иметь повышенное содержание двухатомных молекул по сравнению с содержанием атомной компоненты или наоборот. В этой задаче мы рассматриваем связь этого отношения со спектроскопическими свойствами молекулярных образований для случая цезия (Cs).

(а) Рассмотрим закрытую кювету с парами Cs, находящимися в равновесии при температуре  $T$ . Допустим, что Cs находится преимущественно в атомном состоянии.

Определить относительное содержание  $\text{Cs}_2$  как функцию следующих параметров: температуры  $T$ , парциального давления  $P_{\text{Cs}}$  паров атомарного Cs, энергии диссоциации основного состояния молекулы  $D_e$  (см. рис. 7.1), колебательной постоянной основного состояния  $\omega_e$ , вращательной постоянной основного состояния  $B_e$  и спина  $I$  ядра атома Cs.

Будем считать, что расщепления сверхтонкой структуры и атома, и молекулы пренебрежимо малы по сравнению с  $k_B T$ , хотя вырождения, являющиеся следствием ненулевого ядерного спина, должны учитываться. Отметим, что основное состояние Cs —  $7^2S_{1/2}$ , а основное состояние  $\text{Cs}_2$  —  $1\Sigma_g^+$  (спектроскопические обозначения атомных и молекулярных состояний приведены в Приложении С)<sup>1)</sup>. Будем считать, что вращательная структура  $\text{Cs}_2$  тождественна структуре простого жесткого волчка, что его колебательная структура совпадает с таковой для гармонического осциллятора и что энергии всех уровней электронного возбуждения  $E$  атомов и молекул значительно превосходят  $k_B T$ .

(б) Упростить ответ для случаев  $\omega_e \ll k_B T$  и  $B_e \ll k_B T$ .

<sup>1)</sup> Большая часть наиболее распространенных двухатомных молекул имеет полностью симметричные пространственные волновые функции основного состояния с нулевым полным спином, т. е.  $1\Sigma^+$  или, для димера,  $1\Sigma_g^+$ . Известными исключениями являются такие молекулы, как  $\text{O}_2$  ( $3\Sigma_g^-$ ) и  $\text{NO}$  ( $2\Pi$ ), называемые *свободными радикалами*, поскольку они являются химически неустойчивыми (хотя устойчивыми физически) по той причине, что они имеют один или более неспаренных электронов (и, следовательно, ненулевой спин  $S$ ); см. [Herzberg (1971)].

(в) Используя следующие данные, оценить численно относительное содержание  $\text{Cs}_2$  в запаянной газовой кювете при комнатной температуре и при  $T = 300^\circ\text{C}$ :  $D_e \approx 0,45$  эВ,  $\omega_e \approx 42$   $\text{см}^{-1}$ ,  $B_e \approx 0,012$   $\text{см}^{-2}$  и  $I = 7/2$ ,

$$\log_{10}(P) = -\frac{4042}{T} - 1,4 \log_{10}(T) + 11,176, \quad (7.29)$$

где  $P$  — в торах, а  $T$  — в кельвинах (спектроскопические данные заимствованы из [Radzig и Smirnov (1985)], данные по давлению — из [Honig и Kramer (1969)]).

### Решение

Мы хотим найти равновесное состояние для реакции  $2\text{Cs} \leftrightarrow \text{Cs}_2$ . Согласно закону действия масс (см., например, книгу [Reif (1965)]), равновесие наступает, когда

$$N_{\text{Cs}}^2 N_{\text{Cs}_2}^{-1} = z_{\text{Cs}}^2 z_{\text{Cs}_2}^{-1}, \quad (7.30)$$

где  $N_i$  — число частиц  $i$ , а  $z_i$  — одночастичная функция распределения частиц  $i$ :

$$z = \sum_s e^{-E(s)/(k_B T)}. \quad (7.31)$$

Здесь  $s$  нумерует все внутренние и внешний квантовые состояния частиц, а  $E(s)$  — энергия состояния  $s$ . Функция распределения  $z$ , по сути дела, определяет число состояний, доступных для частицы, с учетом весов, определяемых бoльцмановскими факторами.

Каждая степень свободы системы может быть выделена в виде отдельной суммы. В частности, если выделяются степени свободы, соответствующие движению центра масс, то  $z_i$  можно записать в виде

$$z_i = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p e^{-p^2/(2m_i k_B T)} \sum_{s(int)} e^{-E(s)/(k_B T)} = \quad (7.32)$$

$$= \frac{V}{h^3} (2\pi m_i k_B T)^{3/2} \sum_{s(int)} e^{-E(s)/(k_B T)}, \quad (7.33)$$

где  $m_i$  — масса  $i$ -го образования, и суммирование теперь производится только по внутренним состояниям частицы.

Теперь займемся нумерацией внутренних состояний интересующих нас образований. Для атомов это делается очень просто. Согласно исходному предположению, сверхтонкие расщепления малы по сравнению с тепловой энергией. Таким образом все доступные внутренние состояния атома являются эффективно вырожденными, и их можно пронумеровать путем пересчета электронных и ядерных спиновых состояний. Принимая энергию основного состояния атома за ноль ( $E = 0$ ), мы получаем в результате суммирования по внутренним состояниям

$$\sum_{s(int, \text{Cs})} e^{-E(s)/(k_B T)} \approx (2J+1)(2I+1) = 4I+2, \quad (7.34)$$

где мы явным образом положили  $J = 1/2$ .

Чтобы вычислить функцию распределения молекулы, мы должны пронумеровать состояния внутренних вращательной и колебательной структур. Мы используем стандартные формулы для вращательной энергии ( $E(J) = B_e J(J+1)$ , см. задачу 7.3)

и для колебательной энергии ( $E(v) = \omega_e(v + 1/2)$ , см. задачу 7.1), где  $J$  и  $v$  — вращательные и колебательные квантовые числа, соответственно.

Чтобы корректно пересчитать молекулярные состояния, мы должны учесть вырождение, обусловленное ядерным спином. Полная молекулярная волновая функция должна быть симметричной по отношению к перестановке атомов Cs, так как атомы Cs являются бозонами. Поскольку основное состояние молекулы  $\text{Cs}_2$  является синглетным по отношению к спину электрона, то полная волновая функция электронного спина двухатомной молекулы антисимметрична. Так как основное состояние  $\text{Cs}_2$  является *четным*, симметрия вращательных уровней определяется фактором  $(-1)^J$ . Таким образом для нечетных вращательных состояний (с  $J = 1, 3, \dots$ ) полная волновая функция ядерного спина должна быть симметричной, т. е.  $I_{\text{tot}} = 2I, 2I - 2, \dots$ . Напротив, для четных вращательных состояний полная волновая функция ядерного спина должна быть антисимметричной. Пересчитаем явным образом состояния для полуцелого  $I$  и для нечетного  $J$ . Вырождение  $g_R$  по ядерному спину вращательного состояния с квантовым числом  $J$  равно

$$g_R(J \text{ odd}) = \sum_{I_{\text{tot}}=1,3,\dots}^{2I} (2I_{\text{tot}} + 1). \quad (7.35)$$

В этой сумме  $I + 1/2$  членов. Вводя индекс  $k = I_{\text{tot}} + 1/2$ , мы можем написать:

$$\begin{aligned} g_R(J \text{ odd}) &= \sum_{k=1}^{I+1/2} (4k - 1) = \sum_{k=1}^{I+1/2} 4k - \sum_{k=1}^{I+1/2} 1 = \\ &= 4 \frac{(I + 1/2)(I + 3/2)}{2} - (I + 1/2) = (I + 1)(2I + 1). \end{aligned} \quad (7.36)$$

Аналогичным образом  $g_R(J \text{ четное}) = I(2I + 1)$ .

Заметим, наконец, что все связанные состояния молекулы имеют общий полный сдвиг энергии по отношению к атомным состояниям, который по величине равен  $D_e$  (см. также задачу 7.1). В результате мы находим:

$$\begin{aligned} \sum_{s(\text{int}, \text{Cs}_2)} e^{-E(s)/(k_B T)} &\equiv F(T; D_e, B_e, \omega_e) = \exp\left(\frac{D_e}{k_B T}\right) \left( \sum_{v=0}^{\infty} e^{-[(v+1/2)\omega_e]/(k_B T)} \right) \times \\ &\times (2I + 1) \left( I \sum_{J \text{ even}} (2J + 1) e^{-\frac{B_e J(J+1)}{k_B T}} + (I + 1) \sum_{J \text{ odd}} (2J + 1) e^{-\frac{B_e J(J+1)}{k_B T}} \right), \end{aligned} \quad (7.37)$$

откуда получаем

$$\begin{aligned} F(T; D_0, B_e, \omega_e) &= e^{\frac{D_e}{k_B T}} \frac{e^{-\frac{\omega_e}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\omega_e}{k_B T}}} (2I + 1) \times \\ &\times \left( I \sum_{J=0}^{\infty} (2J + 1) e^{-\frac{B_e J(J+1)}{k_B T}} + \sum_{J'=0}^{\infty} (4J' + 3) e^{-\frac{B_e (2J'+1)(2J'+3)}{k_B T}} \right). \end{aligned} \quad (7.38)$$



Таким образом с помощью выражений (7.33), (7.34) и (7.38), закон действующих масс (7.30) может быть записан в виде

$$N_{\text{Cs}}^2 \frac{V}{h^3} (4\pi m k_B T)^{3/2} F(T; D_e, B_e, \omega_e) = N_{\text{Cs}_2} (4I + 2)^2 \left( \frac{V}{h^3} \right)^2 (2\pi m k_B T)^3, \quad (7.39)$$

где мы пользовались тем, что  $m \equiv m_{\text{Cs}} = m_{\text{Cs}_2}/2$ . Теперь для относительного содержания  $\text{Cs}_2$  имеем

$$\boxed{\frac{N_{\text{Cs}_2}}{N_{\text{Cs}}} = n_{\text{Cs}} h^3 (\pi m k_B T)^{-3/2} \frac{F(T; D_e, B_e, \omega_e)}{(4I + 2)^2}}, \quad (7.40)$$

где  $n_{\text{Cs}} \equiv N_{\text{Cs}}/V$  — плотность атомарного Cs.

**(6)** Мы хотим найти приближенное выражение для  $F(T; D_e, B_e, \omega_e)$ . В предельном случае  $\omega_e \ll k_B T$

$$\frac{e^{-\frac{\omega_e}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\omega_e}{k_B T}}} \approx \frac{k_B T}{\omega_e}. \quad (7.41)$$

Рассмотрим теперь выражение  $\sum_{j=0}^{\infty} (2j + 1) e^{-B_e j(j+1)/(k_B T)}$ . В предельном случае  $B_e \ll k_B T$  это выражение можно приближенно представить в виде интеграла

$$\sum_{j=0}^{\infty} (2j + 1) e^{-\frac{B_e j(j+1)}{k_B T}} \approx \int_0^{\infty} (2x + 1) e^{-\frac{B_e x(x+1)}{k_B T}} dx = \quad (7.42)$$

$$= 2e^{\mu/4} \int_0^{\infty} y e^{-\mu y^2} dy = \quad (7.43)$$

$$\approx \frac{1}{\mu} = \frac{k_B T}{B_e}, \quad (7.44)$$

где мы ввели определение  $\mu = B_e/k_B T$  и сделали замену переменных  $y = x + 1/2$ . Аналогично

$$\sum_{j'=0}^{\infty} (4j' + 3) \exp[-B_e(2j' + 1)(2j' + 3)/(k_B T)] \approx \frac{1}{2} \frac{k_B T}{B_e}. \quad (7.45)$$

Таким образом,

$$F(T; D_e, B_e, \omega_e) \approx e^{\frac{D_e}{k_B T}} \left( \frac{k_B T}{\omega_e} \right) (2I + 1) \left( I \frac{k_B T}{B_e} + \frac{1}{2} \frac{k_B T}{B_e} \right) = \quad (7.46)$$

$$= e^{\frac{D_e}{k_B T}} \frac{k_B T}{\omega_e} \frac{k_B T}{B_e} \frac{(2I + 1)^2}{2}, \quad (7.47)$$

и для относительного содержания  $\text{Cs}_2$  получаем

$$\boxed{\frac{N_{\text{Cs}_2}}{N_{\text{Cs}}} \approx \frac{n_{\text{Cs}}}{2\sqrt{2}} \left( \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \right)^3 e^{\frac{D_e}{k_B T}} \left( \frac{k_B T}{\omega_e} \right) \left( \frac{k_B T}{B_e} \right)}. \quad (7.48)$$

Поучительно обратить внимание на происхождение каждого из членов в правой части соотношения (7.48). Два первых множителя ( $\propto n_{\text{Cs}}/T^{3/2}$ ) соответствуют отно-

шению объемов фазового пространства, доступных одной молекуле и двум атомам. Экспоненциальный множитель определяется больцмановским весом, соответствующим энергии связи молекулы. Два последних множителя учитывают число колебательных и вращательных подуровней, заселенных при температуре  $T$ .

Заметим, что вырождение по ядерному спину  $I$  в окончательном выражении отсутствует. Это можно понять, если заметить (на время забыв об усложнениях, связанных с перестановочной симметрией), что число состояний ядерного спина, доступных в каждом состоянии молекулы, равно квадрату числа состояний, доступных каждому атому. Корректный учет состояний, запрещенных по перестановочной симметрии, может изменить этот вывод лишь на множитель порядка единицы.

**(в)** При определении численного значения относительного содержания димеров важно следить за выбором единиц измерения. Здесь мы будем использовать единицы CGS, как это принято в данной книге. Для преобразования единиц измерения мы используем формулы из Приложения А. Отметим, в частности, что

$$E[\text{CGS}] = hc \cdot E[\text{см}^{-1}], \quad (7.49)$$

и

$$E[\text{CGS}] = 1,6 \cdot 10^{-12} E[\text{эВ}]. \quad (7.50)$$

Мы также пользуемся законом идеального газа

$$P = nk_B T \quad (7.51)$$

и преобразованием единиц давления

$$P[\text{CGS}] \approx 1,33 \cdot 10^3 P[\text{тор}]. \quad (7.52)$$

При  $T = 300^\circ\text{C} \sim 573\text{ K}$ , из выражения (7.29) находим

$$P(T) \approx 1,8 \text{ тор} \approx 2,4 \cdot 10^3 [\text{CGS}];$$

$$k_B T \approx 7,9 \cdot 10^{-14} \text{ эрг};$$

$$D_e \approx 7,2 \cdot 10^{-13} \text{ эрг};$$

$$\omega_e \approx 8,4 \cdot 10^{-15} \text{ эрг};$$

$$B_e \approx 2,4 \cdot 10^{-18} \text{ эрг};$$

$$m \approx 133m_p \approx 2,2 \cdot 10^{-22} \text{ г}.$$

Эти значения показывают, что при таких условиях приближения п. (б) хорошо выполняются. В результате получаем

$$\boxed{\frac{N_{\text{Cs}_2}}{N_{\text{Cs}}} (T = 300^\circ\text{C}) \approx 1,8 \cdot 10^{-2}.} \quad (7.53)$$

При комнатной температуре ( $T = 22^\circ\text{C}$ ) мы находим

$$\boxed{\frac{N_{\text{Cs}_2}}{N_{\text{Cs}}} (T = 22^\circ\text{C}) \approx 6,5 \cdot 10^{-5}.} \quad (7.54)$$

Различие между содержанием молекул при этих двух температурах обусловлено в основном различием давлений атомарного Cs. При комнатной температуре это давление  $P \approx 1 \cdot 10^{-6}$  тор, что на 6 порядков величины меньше, чем при  $T = 300$  °C.

## 7.5. Изотопические сдвиги в молекулярных переходах

Как и в атомных спектрах (см. задачу 1.9), сдвиги линий молекулярных спектров происходят из-за различия масс и объемов ядер разных изотопов.

(а) Рассмотрим уровень энергии двухатомной молекулы АВ, соответствующий квантовым числам  $J$  (вращение) и  $v$  (колебание) в некотором электронном состоянии (обозначенном через  $Y$ ). Определить влияние замещения изотопа  $B$  изотопом  $B'$  на энергию этого состояния. Определить, как энергия электронного состояния  $T_e(Y)$ , колебательная постоянная  $\omega_e(Y)$  и вращательная постоянная  $B_e(Y)$  меняются при изменении массы ядра. (В этой задаче мы пренебрегаем эффектами, связанными с изменением размера ядра.) Будем считать, что относительное изменение массы ядра мало, т. е.  $\Delta m = m_{B'} - m_B \ll m_B$ , где  $m$  обозначает массу. Будем для определенности считать, что атом  $A$  содержит основную массу молекулы, т. е.  $m_B \ll m_A$ .

(б) Доказать, что сдвиги линий колебательной структуры это основной изотопический эффект, наблюдаемый в молекулярных спектрах. Показать, что эти сдвиги могут значительно превосходить типичные значения вращательных расщеплений, так что различные изотопические образования могут обнаруживать изолированные вибронные (электронно-колебательные) *канты*<sup>1)</sup>.

(в) Переход  $A(v' = 21) \leftrightarrow X(v'' = 0)$  молекулы ICl был обстоятельно исследован методами лазерной спектроскопии [G. Bazalgette и др. (1999) и ссылки в ней]. Найти изотопический сдвиг канта этого перехода при замещении  $^{35}\text{Cl}$  на  $^{37}\text{Cl}$ . Сверхтонкой структурой можно пренебречь. Сравнить этот сдвиг с типичными вращательными и колебательными расщеплениями этого перехода. Можно воспользоваться следующими приближенными данными для молекулы ICl [(1985)]:

Таблица 7.1

Энергии электронных состояний и вращательные и колебательные константы для  $\text{I}^{35}\text{Cl}$  (в  $\text{см}^{-1}$ )

Состояние	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$
$A[{}^3\Pi_1]$	13742	212	0,084
$X[{}^1\Sigma^+]$	0	384	0,114

Отметим, что мы использовали обычные молекулярные обозначения, когда основное электронное состояние молекулы обозначается буквой  $X$ , а выше расположенные состояния обозначаются другими буквами, такими как  $A$ .

<sup>1)</sup> Термин *кант* полосы относится к типичному кластерированию спектральных линий в молекулярных электронных спектрах для любого конкретного электронного перехода (см., например, [Herzberg (1989)] для более детального обсуждения). Канты обычно наблюдаются вблизи нижайших вращательных линий, т. е. вблизи разности энергий между уровнями  $J' = 0$  и  $J'' = 0$  верхнего и нижнего вибронных состояний соответственно.

### Подсказка

В п. (б) для оценки величины электронного, колебательного и вращательного расщеплений можно воспользоваться анализом размерностей; полученные результаты позволят оценить изотопические сдвиги.

### Решение

Электронная энергия  $T_e$  зависит от масс изотопов через приведенную массу электрона  $\mu_e$ :

$$\mu_e = \frac{m_e(m_A + m_B)}{m_e + (m_A + m_B)} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_A + m_B}\right). \quad (7.55)$$

(Напомним, что мы исходили из предположения, что электронная орбита охватывает оба ядра; это должно служить разумным приближением для электрона, находящегося на валентной орбитали.) Таким образом, отношение приведенных масс электрона для двух изотопических образований равно:

$$\frac{\mu'_e}{\mu_e} \approx \frac{\left(1 - \frac{m_e}{m_A + m_{B'}}\right)}{\left(1 - \frac{m_e}{m_A + m_B}\right)} \approx 1 + \frac{m_e}{m_A} \frac{\Delta m}{m_A}. \quad (7.56)$$

Постоянная Ридберга  $R_\infty$  пропорциональна массе электрона. Таким образом электронная энергия для нового изотопического образования описывается выражением

$$T'_e = \frac{\mu'_e}{\mu_e} T_e \approx \left(1 + \frac{m_e}{m_A} \frac{\Delta m}{m_A}\right) T_e. \quad (7.57)$$

В первом порядке вращательная и колебательная структуры смещаются в силу того, что приведенная масса *молекулярного* движения меняется при изменении массы ядра. (Существуют также поправки более высоких порядков к вращательно-колебательной структуре, например, поправки, связанные со сдвигами электронных волновых функций, вызванными изотопическим замещением: мы ими здесь пренебрегаем.)

Приведенная масса молекулярного движения дается формулой

$$\mu_M = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}, \quad (7.58)$$

где  $m_{A(B)}$  — масса ядра  $A(B)$ <sup>1)</sup>. Таким образом, отношение приведенных масс для двух изотопических образований имеет вид:

$$\frac{\mu'_M}{\mu_M} = \frac{m_{B'}}{m_B} \frac{m_A + m_B}{m_A + m_{B'}}. \quad (7.59)$$

В приближении  $\Delta m = m_{B'} - m_B \ll m_B$  и  $m_B \ll m_A$  вид этого отношения можно упростить:

$$\frac{\mu'_M}{\mu_M} \approx \left(1 + \frac{\Delta m}{m_B}\right); \quad (7.60)$$

кроме того,  $\mu_M \approx \mu'_M \approx m_B$ .

<sup>1)</sup> Заметим, что, строго говоря, мы должны здесь использовать массу *атома*  $A$ , т. е. массу ядра  $A$  плюс масса  $Z$  электронов, где  $Z$  — заряд ядра изотопа  $A$ . В большинстве случаев массой электронов в этих расчетах можно пренебречь, что мы и делаем.

Колебательная частота определяется эффективной упругой константой  $k$  молекулы, так что  $\omega_e = \sqrt{k/\mu_M}$  (задача 7.1). Таким образом, колебательная константа для нового изотопического образования дается формулой

$$\omega'_e = \sqrt{\frac{\mu_M}{\mu'_M}} \omega_e \approx \left(1 - \frac{\Delta m}{2m_B}\right) \omega_e. \quad (7.61)$$

Вращательная постоянная определяется моментом инерции молекулы  $I$ , так что  $B_e = \hbar^2/(2I)$ . Момент инерции  $I$  определяется межъядерным расстоянием  $r_e$  и приведенной массой молекулы:  $I = \mu_M (r_e)^2$ . Поэтому вращательная константа для нового изотопического образования дается выражением

$$B'_e = \frac{\mu_M}{\mu'_M} B_e \approx \left(1 - \frac{\Delta m}{m_B}\right) B_e. \quad (7.62)$$

**(б)** Как предлагалось, мы начнем с оценки относительной величины электронного, колебательного и вращательного расщеплений в молекуле. Из соображений размерности можно ожидать, что электронная энергия дается соотношением  $T_e \sim R_\infty \sim e^2/a_0$ .

Для колебательной энергии рассмотрим эффективную упругую постоянную молекулы  $k$ . Поскольку она должна определяться электрическими силами, мы, из соображений размерности, можем ожидать, что  $k \sim e^2/a_0^3$ . Таким образом, отношение колебательной энергии к электронной имеет вид

$$\frac{\hbar\omega_e}{T_e} \sim \hbar \sqrt{\frac{e^2}{a_0^3 \mu_M}} \frac{a_0}{e^2} \sim \frac{\hbar}{ea_0^{1/2}} \frac{1}{m_B^{1/2}} \sim \sqrt{\frac{\hbar^2}{e^2 a_0}} \sqrt{\frac{1}{m_B}} \sim \sqrt{\frac{m_e}{m_B}}. \quad (7.63)$$

Заметим, что существенное для вращательной энергии межъядерное расстояние равно  $r_e \sim a_0$ , так что момент инерции  $I \sim \mu_M a_0^2$ , а вращательная постоянная имеет вид

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2I} \sim \frac{\hbar^2}{a_0^2 \mu_M}. \quad (7.64)$$

Исходя из этого, для отношения вращательной энергии к электронной мы можем написать

$$\frac{B_e}{T_e} \sim \frac{\hbar^2}{a_0^2 \mu_M} \frac{a_0}{e^2} \sim \frac{\hbar^2}{a_0 e^2} \frac{1}{m_B} \sim \frac{m_e}{m_B}. \quad (7.65)$$

Заметим, что поскольку  $m_e/m_B \ll 1$  для любых ядер  $B$ , мы возвращаемся к известной иерархии энергий  $B_e \ll \hbar\omega_e \ll T_e$ .

Теперь мы можем параметризовать изотопические сдвиги  $\Delta E_i$ , связанные с каждым типом движения. Для электронной энергии мы находим:

$$\Delta E_i(\text{el.}) = (T'_e - T_e) = \frac{m_e}{m_A} \frac{\Delta m}{m_A} T_e \approx \frac{m_e}{m_B} \frac{\Delta m}{m_B} \left(\frac{m_B}{m_A}\right)^2 T_e. \quad (7.66)$$

Для колебательной энергии

$$\Delta E_i(\text{vib.}) = \hbar(\omega'_e - \omega_e) = \frac{\Delta m}{2m_B} \hbar\omega_e \sim \frac{\Delta m}{m_B} \sqrt{\frac{m_e}{m_B}} T_e, \quad (7.67)$$

а для вращательной энергии

$$\Delta E_i(\text{rot.}) = (B'_e - B_e) = \frac{\Delta m}{m_B} B_e \sim \frac{\Delta m}{m_B} \frac{m_e}{m_B} T_e. \quad (7.68)$$

Таким образом, изотопические сдвиги находятся в отношении

$$\Delta E_i(\text{vib.}) : \Delta E_i(\text{rot.}) : \Delta E_i(\text{el.}) = \sqrt{\frac{m_e}{m_B}} : \frac{m_e}{m_B} : \frac{m_e}{m_B} \left(\frac{m_B}{m_A}\right)^2, \quad (7.69)$$

и мы видим, что действительно

$$\boxed{\Delta E_i(\text{vib.}) \gg \Delta E_i(\text{rot.}) \gg \Delta E_i(\text{el.})}. \quad (7.70)$$

Чтобы сопоставить вращательные изотопические сдвиги с вращательной энергией, напомним

$$\frac{\Delta E_i(\text{vib.})}{B_e} \sim \frac{\Delta m}{m_B} \sqrt{\frac{m_e}{m_B}} T_e \sim \frac{\Delta m}{m_B} \sqrt{\frac{m_B}{m_e}}. \quad (7.71)$$

Используя «типичные» значения, такие как  $m_B \sim 20m_p$ ,  $\Delta m \approx 2m_p$  и замечая, что  $m_p/m_e \approx 2000$ , получаем

$$\frac{\Delta E_i(\text{vib.})}{B_e} \sim \frac{\Delta m}{m_B} \sqrt{\frac{m_B}{m_e}} \sim \frac{2}{20} \sqrt{20 \cdot 2000} \sim 20 \gg 1. \quad (7.72)$$

Таким образом, колебательный изотопический сдвиг действительно может превосходить вращательное расщепление. Этот эффект особенно ярко выражен для высоко-возбужденных колебательных уровней с квантовыми числами  $v \gg 1$ , поскольку для них изотопический сдвиг приблизительно в  $\approx 2v + 1$  раз больше, чем для основного колебательного состояния.

**(в)** Подставляя в (6.51) отношение  $\Delta m/m_B \approx 2/35$ , находим сдвиг колебательных постоянных:

$$\Delta\omega_e[X] = \omega'_e - \omega_e \approx -11 \text{ см}^{-1} \quad (7.73)$$

$$\text{и} \quad \Delta\omega_e[A] \approx -6 \text{ см}^{-1}. \quad (7.74)$$

Итак, сдвиг частоты канта перехода  $A(v' = 21) \leftrightarrow X(v'' = 0)$  имеет вид

$$\boxed{\Delta\nu \approx (21,5)(6) - (0,5)(11) \approx 123,5 \text{ см}^{-1}}. \quad (7.75)$$

Отметим, что этот сдвиг значительно превышает типичное вращательное расщепление ( $\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$ ) и является фактически сопоставимым с типичным колебательным расщеплением в состоянии  $A$ !

## 7.6. Электрические дипольные моменты полярных молекул

Рассмотрим упрощенную модель двухатомной полярной молекулы в форме жесткого волчка (с моментом инерции  $I$  и вращательной постоянной  $B_e = \hbar^2/(2I)$ ) с постоянным электрическим дипольным моментом  $\vec{d}$ , направленным по оси волчка. (Мы считаем, что волчок в данной задаче не имеет внутренней структуры.) Собственные состояния такого волчка это состояния с определенными значениями углового момента  $J$  и его проекции вдоль  $\hat{z}$ . В системе координат центра масс волчка волновая функция состояния с квантовыми числами  $(J, m)$  — это просто сферические гармоники:  $\psi_{J,m}(\theta, \phi) = Y_J^m(\theta, \phi)$ .

(а) Показать, что в любом собственном состоянии среднее значение электрического дипольного момента равно нулю  $\langle \vec{d} \rangle = 0$ .

(б) Пусть к системе приложено электрическое поле  $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E} \hat{z}$ . Пользуясь теорией возмущений, определить энергетические сдвиги низшего порядка и найти возмущенные волновые функции состояния с номинальными квантовыми числами  $\mathcal{J}$  (где величина  $\mathcal{J}$  — произвольна) и  $m = 0$ . При каком условии поле  $\mathcal{E}$  может считаться слабым?

(в) Показать, что для возмущенных состояний  $\langle \vec{d} \rangle \neq 0$ . Определить знак  $\langle \vec{d} \rangle$  в состояниях  $|\mathcal{J}, m\rangle = |0, 0\rangle$  и  $|1, 0\rangle$ .

### Решение

(а) Оператор дипольного момента может быть записан в виде

$$\vec{d} = d[\sin \theta \cos \phi \hat{x} + \sin \theta \sin \phi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}]. \quad (7.76)$$

Мы пользуемся стандартным определением сферических гармоник:

$$Y_{\mathcal{J}}^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2\mathcal{J}+1)}{4\pi} \frac{(\mathcal{J}-m)!}{(\mathcal{J}+m)!}} P_{\mathcal{J}}^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (7.77)$$

где  $P_{\mathcal{J}}^m$  — ассоциированные функции Лежандра. Среднее значение  $d_z$  в состоянии  $(\mathcal{J}, m)$ , следовательно, равно

$$\langle d_z \rangle = \int |Y_{\mathcal{J}}^m(\theta, \phi)|^2 \cos \theta d\Omega \propto \int_{-1}^{+1} |P_{\mathcal{J}}^m(x)|^2 x dx. \quad (7.78)$$

Этот интеграл обращается в ноль, так как  $|P_{\mathcal{J}}^m(x)|^2$  — четная функция от  $x$  (а  $x$  — функция нечетная).

Среднее значение  $d_x$  равно

$$\langle d_x \rangle = \int |Y_{\mathcal{J}}^m(\theta, \phi)|^2 \sin \theta \cos \phi d\Omega \propto \int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi = 0. \quad (7.79)$$

Аналогичным образом  $\langle d_y \rangle = 0$ .

Даже не вычисляя явно этих интегралов, зануление  $\langle \vec{d} \rangle$  может быть предсказано на основании симметричных соображений. Поскольку собственные состояния энергии жесткого волчка являются одновременно собственными состояниями оператора четности ( $P$ ) (с собственным значением  $(-1)^{\mathcal{J}}$ ), среднее значение любого  $P$ -нечетного оператора  $\vec{d}$  должно обращаться в ноль. Более того, ненулевая величина  $\langle \vec{d} \rangle$  нарушила бы время-инверсионную симметрию ( $T$ ). Единственное пространственное направление, связанное с собственным состоянием, задается  $\langle \vec{\mathcal{J}} \rangle$ , так что  $\langle \vec{d} \rangle \propto \langle \vec{\mathcal{J}} \rangle$ . Однако  $\langle \vec{d} \rangle$  — нечетно по отношению к  $T$ , тогда как  $\langle \vec{\mathcal{J}} \rangle$  — четно. Таким образом, если  $\langle \vec{d} \rangle \neq 0$ , то  $T$ -симметрия будет нарушена.

Возможности существования дипольных моментов, нарушающих  $P$  и  $T$  инвариантность, обсуждаются в задаче 4.8.

(б) Обусловленный электрическим полем возмущающий гамильтониан имеет вид

$$H' = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -d_z \mathcal{E} = -d \mathcal{E} \cos \theta. \quad (7.80)$$

Энергетические сдвиги первого порядка, связанные с  $H'$ ,  $E_{(j,m)}^{(1)} = \langle H' \rangle_{(j,m)}$ , обращаются в ноль согласно результатам п. (а). Чтобы рассчитать возмущенные волновые функции и энергетические сдвиги второго порядка состояний  $|j, m = 0\rangle$ , мы должны определить недиагональные матричные элементы  $H'$ :

$$\langle j', m' | H' | j, 0 \rangle = -d\varepsilon \int Y_{j'}^{m'*}(\theta, \phi) \cos \theta Y_j^0(\theta, \phi) d\Omega. \quad (7.81)$$

Мы упростим интеграл с помощью теоремы Вигнера–Эккарта и учета того факта, что  $\cos \theta$  — оператор ранга  $\kappa = 1$ , с проекцией  $q = 0$  (см. Приложение F). Таким образом,

$$\langle j', m' | H' | j, 0 \rangle = -d\varepsilon \frac{\langle j' || \cos \theta || j \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle j, 0, 1, 0 | j', m' \rangle \propto \delta_{m', 0} \delta_{j', j \pm 1}. \quad (7.82)$$

(Вопрос о том, почему матричный элемент обращается в ноль при  $j' = j$  и  $m = m' = 0$  обсуждается в задаче 9.5.)

Мы можем непосредственно вычислить матричный элемент выражения (7.81) для случая  $m = m' = 0$ :

$$\langle j', 0 | H' | j, 0 \rangle = -\frac{d\varepsilon}{2} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \int_{-1}^{+1} P_{j'}(x) x P_j(x) dx. \quad (7.83)$$

Интеграл от полиномов Лежандра ( $P_j(x) = P_j^0(x)$ ) можно вычислить с помощью стандартных рекурсивных соотношений; в [Jackson (1975)] показано, что

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} P_{j'}(x) x P_j(x) dx &= \frac{2(j+1)}{(2j+1)(2j+3)} \quad (j' = j+1); \\ &= \frac{2j}{(2j-1)(2j+1)} \quad (j' = j-1). \end{aligned} \quad (7.84)$$

Таким образом

$$\begin{aligned} \langle j', 0 | H' | j, 0 \rangle &= -d\varepsilon \frac{(j+1)}{\sqrt{(2j+1)(2j+3)}} \quad (j' = j+1); \\ &= -d\varepsilon \frac{j}{\sqrt{(2j-1)(2j+1)}} \quad (j' = j-1). \end{aligned} \quad (7.85)$$

Вспоминая, что невозмущенная энергия состояния  $|j, m\rangle$  имеет вид  $E_j = B_e \times j(j+1)$ , энергетические сдвиги второго порядка (после некоторых алгебраических преобразований) могут быть записаны в виде

$$E_{(j,0)}^{(2)} = \sum_{j'=j \pm 1} \frac{|\langle j', m' | H' | j, 0 \rangle|^2}{E_j - E_{j'}} = \frac{d^2 \varepsilon^2}{B_e} \frac{1}{2(2j-1)(2j+3)}. \quad (7.86)$$

Возмущенные волновые функции первого порядка имеют вид

$$|j, 0\rangle^{(1)} = |j, 0\rangle + \eta_- |j-1, 0\rangle + \eta_+ |j+1, 0\rangle, \quad (7.87)$$

где

$$\eta_- = \frac{\langle j-1, 0 | H' | j, 0 \rangle}{E_j - E_{j-1}} = -\frac{d\varepsilon}{2B_e} \frac{1}{\sqrt{(2j-1)(2j+1)}} \quad (7.88)$$



$$\text{и} \quad \eta_+ = \frac{\langle j+1, 0 | H' | j, 0 \rangle}{E_j - E_{j+1}} = \frac{d\mathcal{E}}{2B_e} \frac{1}{\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}. \quad (7.89)$$

Условие малости электрического поля, позволяющее использовать теорию возмущений, может быть записано (для  $j > 0$ ) в виде

$$\mathcal{E} \ll \frac{B_e j}{d}. \quad (7.90)$$

**(в)** На основе того же аргумента, что и в п. (а), даже для возбужденных состояний  $\langle d_x \rangle = \langle d_y \rangle = 0$ . Однако теперь  $\langle d_z \rangle \neq 0$ , и

$$\begin{aligned} \langle d_z \rangle_{(j,0)} &= 2\eta_- \langle j, 0 | d_z | j-1, 0 \rangle + 2\eta_+ \langle j, 0 | d_z | j+1, 0 \rangle = \\ &= -\frac{2}{\mathcal{E}} \left( \frac{\langle j-1, 0 | H' | j, 0 \rangle^2}{E_j - E_{j-1}} + \frac{\langle j+1, 0 | H' | j, 0 \rangle^2}{E_j - E_{j+1}} \right) = \\ &= -d \left( \frac{d\mathcal{E}}{B_e} \right) \frac{1}{(2j-1)(2j+3)}, \end{aligned} \quad (7.91)$$

где мы использовали соотношения (7.85), (7.88) и (7.89).

Обратим внимание на то, что состояния с  $j = 0$  и  $j = 1$  имеют различные знаки  $\langle d_z \rangle$ :

$$\langle d_z \rangle_{(0,0)} = +d \cdot \frac{d\mathcal{E}}{3B_e} > 0, \quad (7.92)$$

в то время как

$$\langle d_z \rangle_{(1,0)} = -d \cdot \frac{d\mathcal{E}}{5B_e} < 0. \quad (7.93)$$

На первый взгляд может показаться удивительным, что состояние  $j = 1$  приобретает дипольный момент, направленный *против* приложенного электрического поля! Чтобы понять это явление, заметим, что разница в знаках сохраняется (в действительности разность растет по величине), если пренебречь примешиванием состояния  $j = 2$  к состоянию  $j = 1$ . Если мы рассматриваем просто двухуровневую систему, образованную состояниями  $j = 0$  и  $j = 1$ , физический смысл различия знаков становится более очевидным. Как и для любой двухуровневой системы, приложение статического возмущения заставляет энергетические уровни отталкиваться друг от друга: нижний уровень  $j = 0$  движется вниз по энергии, а верхний уровень  $j = 1$  движется вверх. Поскольку в этом случае гамильтониан возмущения имеет вид  $H' = -d_z E$ , этот энергетический сдвиг может иметь место только из-за того, что возмущенные состояния приобретают ненулевой момент  $\langle d_z \rangle$ . Различные знаки энергетических сдвигов должны управляться различными знаками  $\langle d_z \rangle$ . Это именно то, что мы показали.

Заметим, что ненулевое значение  $\langle \vec{d} \rangle$  не нарушает ни один из симметричных аргументов, приведенных в п. (а). В присутствии внешнего электрического поля  $\langle \vec{E} \rangle$  собственные состояния больше не являются состояниями определенной четности; дипольный момент  $\langle \vec{d} \rangle \propto \langle \vec{E} \rangle$  не нарушает  $T$ -инвариантность, поскольку и  $\langle \vec{d} \rangle$ , и  $\langle \vec{E} \rangle$  являются  $T$ -четными.

Полученный здесь зависящий от состояния дипольный момент может быть полезен для конструирования зависящих от состояния энергетических сдвигов, необхо-

димых для ячеек квантовой логики (см., например, [DeMille (2002), Vengco и др. (1995)]).

## 7.7. Скалярное взаимодействие ядерных спинов в молекулах

В этой задаче мы рассматриваем открытое Ханом и Максвеллом [Hahn и Maxwell (1952)] явление «J-связи» (также известное под названием скалярной связи) ядерных спинов в спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Для системы двух ядерных спинов  $\vec{I}_a$  и  $\vec{I}_b$  этот эффект находит свое выражение в виде члена гамильтониана вида

$$H_J = J \vec{I}_a \cdot \vec{I}_b. \quad (7.94)$$

(Здесь  $J$  — коэффициент, который не следует путать с полным угловым моментом.) Пусть спины ориентированы в одном направлении. Заметим, что гамильтониан (7.94) не зависит от угла между этим направлением и вектором  $\hat{r}$ , направленным от одного спина к другому. Этим гамильтониан J-связи отличается от гамильтониана прямого диполь-дипольного взаимодействия  $H_d$ :

$$H_d = g_a g_b \mu_N^2 \frac{\vec{I}_a \cdot \vec{I}_b - 3(\vec{I}_a \cdot \hat{r})(\vec{I}_b \cdot \hat{r})}{r_{ab}^3}, \quad (7.95)$$

где  $g_{a(b)} \mu_N I_{a(b)}$  — магнитный момент спина  $a(b)$ ,  $g_{a(b)}$  — ядерные  $g$ -факторы,  $\mu_N$  — ядерный магнетон, а  $r_{ab}$  — расстояние между спинами.

Пусть два рассматриваемых спина связаны с ядрами одной и той же молекулы. В жидких или газообразных образцах вращение молекулы быстро зануляет член диполь-дипольного взаимодействия при усреднении и делает его ненаблюдаемым<sup>1)</sup>. Член J-связи, напротив, при усреднении не зануляется.

J-связь находит применение в вентилях квантовой логики квантовых компьютеров на основе ЯМР (введение в эту область и соответствующие ссылки можно найти, например, в [Nielsen и Chuang (2000)]) и может быть полезна при расшифровке структуры сложных молекул по их спектрам ЯМР [Slichter (1990)].

Чтобы понять скалярную связь, можно воспользоваться простой мысленной моделью. Представим себе молекулу, состоящую из атома  ${}^3\text{He}$  в основном состоянии и нейтрона ( $I_b = I_n = 1/2$ ), находящегося на фиксированном расстоянии  $R$  от ядра атома  ${}^3\text{He}$  ( $I_a = I_{\text{He}} = 1/2$ ). Эта модель включает в себя всю основную физику эффекта и в то же время позволяет использовать простые атомные волновые функции вместо молекулярных волновых функций.

**(а)** Показать, что усредненная по всем направлениям  $\hat{r}$  величина  $H_d$  (7.95) равна нулю.

**(б)** Показать, что сверхтонкое взаимодействие между электронами атома и ядром  ${}^3\text{He}$  вносит малую примесь состояния  $1s2s\ {}^3S_1$  в основное состояние  $1s^2\ {}^1S_0$ . Найти величину этой примеси. Можно считать, что волновые функции гелия являются просто произведениями водородоподобных волновых функций; мы при этом пренебрегаем всеми эффектами электрон-электронных кулоновских взаимодействий.

<sup>1)</sup> Мы предполагаем, что ядерные спины никак не связаны с осью молекулы и вращение молекулы не сказывается на их ориентации.

(в) Показать, что примешивание состояния  $^3S_1$  проявляется в виде скалярного взаимодействия между спином нейтрона и спином ядра  $^3\text{He}$ .

Найти выражение для величины J-связи как функции  $R$ . Найти величину  $J$  (в единицах частоты) и сравнить результат с величиной прямого диполь-дипольного взаимодействия для типичных межъядерных расстояний в молекуле ( $R \sim 2a_0$ ).

### Решение

(а) Рассмотрим, для определенности, случай, когда проекции ядерного спина на ось  $z$  равны  $m_{I_a} = m_{I_b} = +1/2$ ; все прочие комбинации  $m_{I_a}$  и  $m_{I_b}$  дают идентичные результаты. Будем характеризовать направление  $\hat{r}$  полярными углами  $\theta$  и  $\varphi$ . Тогда числитель (7.95) приобретает вид

$$\vec{I}_a \cdot \vec{I}_b - 3(\vec{I}_a \cdot \hat{r})(\vec{I}_b \cdot \hat{r}) \propto 1 - 3\cos^2\theta. \quad (7.96)$$

Таким образом гамильтониан (7.95), усредненный по всем направлениям, как и предполагалось, имеет вид

$$\langle H_d \rangle_\Omega \propto \int (1 - 3\cos^2\theta) d\Omega \propto \int_{-1}^1 (1 - 3x^2) dx = 0. \quad (7.97)$$

(б) Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия для двух  $s$ -электронов, взаимодействующих со спином ядра  $^3\text{He}$ , имеет вид

$$H_{\text{hf}} = -\frac{16\pi}{3} \mu_0 g_{He} \mu_N (\vec{s}_1 \cdot \vec{I}_a \delta^3(\vec{r}_1) + \vec{s}_2 \cdot \vec{I}_a \delta^3(\vec{r}_2)) = H_{\text{hf}1} + H_{\text{hf}2}, \quad (7.98)$$

где индексы 1 и 2 относятся к электронам. (Вывод этого гамильтониана можно найти в задаче 1.4). Это скалярный оператор в пространстве полного углового момента  $F = S + I$ , способный связывать члены с различными значениями полного электронного спина  $S$ . Иначе говоря,  $F$  и  $m_F$  при наличии сверхтонкого взаимодействия  $H_{\text{hf}}$  — величины сохраняющиеся, а  $S$  — нет. (Обсуждение других эффектов, связанных с недиагональным смешиванием состояний за счет сверхтонкого взаимодействия, можно найти в задачах 1.11 и 3.18.) Таким образом, сверхтонкое взаимодействие обеспечивает малую примесь возбужденных состояний, таких как состояние  $1s2s\ ^3S_1$  ( $F = 1/2$ ), к основному состоянию номинального вида  $1s^2\ ^1S_0$ .

Грубая оценка величины такого примешивания дается выражением

$$\begin{aligned} \frac{\langle ^3S_1 | H_{\text{hf}} | ^1S_0 \rangle}{E_{^3S_1} - E_{^1S_0}} &\sim \mu_0 g_{He} \mu_N |\psi(0)|^2 \frac{1}{R_\infty} \sim \\ &\sim (\alpha e a_0) \left( \frac{m_e}{m_p} \alpha e a_0 \right) \left( \frac{1}{a_0^3} \right) \left( \frac{a_0}{e^2} \right) \sim \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 \sim 10^{-7}. \end{aligned} \quad (7.99)$$

Здесь мы использовали привычные соотношения

$$g_{He} \mu_N = g_{He} (m_e/m_p) \mu_0 = g_{He} (m_e/m_p) (\alpha/2) e a_0 \quad (7.100)$$

и пренебрегли множителями порядка единицы.

Теперь вычислим матричный элемент  $\langle e, M_e | H_{\text{hf}} | g, M_g \rangle$ , где

$$|g, M_g\rangle = |1s^2\ ^1S_0(F = 1/2, M_g)\rangle$$

и

$$|e, M_e\rangle = |1s2s\ ^3S_1(F=1/2, M_e)\rangle.$$

Поскольку  $H_{\text{hf}}$  — это скалярный оператор, ненулевыми являются только матричные элементы с  $M_e = M_g = M$ , и их значения при этом не зависят от  $M$ . Для определенности положим  $M = 1/2$  и разложим пространственные и спиновые волновые функции:

$$|g\rangle = \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\beta_2\rangle - |\beta_1\alpha_2\rangle|\beta_1\alpha_2\rangle)|\uparrow\rangle; \quad (7.101)$$

$$|e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2) - \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s}(\vec{r}_2)) \times \\ \times \left[ \sqrt{\frac{2}{3}}|\alpha_1\alpha_2\rangle|\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{|\alpha_1\beta_2\rangle + |\beta_1\alpha_2\rangle}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \right], \quad (7.102)$$

где  $\psi(\vec{r})$  — пространственные части водородоподобных функций; состояния  $|\alpha\rangle$  и  $|\beta\rangle$  соответствуют ориентации электронного спина вверх и вниз, а обозначения  $|\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\rangle$  относятся к соответствующим ориентациям спина ядра  $^3\text{He}$ . Заметим, что мы явным образом включили коэффициенты Клебша–Гордона, необходимые, чтобы связать состояния  $S = 1$  и  $I = 1/2$  и образовать  $|e\rangle$ -состояние ( $F = 1/2, M = 1/2$ ).

Можно заметить, что два члена гамильтониана  $H_{\text{hf}}$ , связанные с двумя электронами, отличаются только перестановкой индексов  $1 \leftrightarrow 2$ . Поскольку обе функции  $|e\rangle$  и  $|g\rangle$  антисимметричны по отношению к перестановке, матричные элементы обоих членов гамильтониана  $H_{\text{hf}}$  будут идентичными. В результате мы можем написать:

$$\langle e|H_{\text{hf}}|g\rangle = 2\langle e|H_{\text{hf}1}|g\rangle = -\frac{32\pi}{3}\mu_0g_{\text{He}}\mu_N\langle e|\vec{s}_1\cdot\vec{I}_a\delta^3(\vec{r}_1)|g\rangle = \\ = -\frac{32\pi}{3}\mu_0g_{\text{He}}\mu_N\frac{1}{\sqrt{2}}\int\psi_{2s}(\vec{r}_1)\delta^3(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_1)d^3\vec{r}_1 \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{3}}\left[-\langle\beta_1\uparrow|\vec{s}_1\cdot\vec{I}_a|\alpha_1\downarrow\rangle - \frac{1}{2}\langle\alpha_1\uparrow|\vec{s}_1\cdot\vec{I}_a|\alpha_1\uparrow\rangle + \frac{1}{2}\langle\beta_1\uparrow|\vec{s}_1\cdot\vec{I}_a|\beta_1\uparrow\rangle\right]. \quad (7.103)$$

Вычисляя матричные элементы оператора  $\vec{s}_1\cdot\vec{I}_a$  либо с помощью сферических компонент (см. задачу 1.11), либо пользуясь стандартными операторами повышения и понижения, мы получаем

$$\langle g|H_{\text{hf}}|e\rangle = \frac{8\pi}{\sqrt{6}}\mu_0g_{\text{He}}\mu_N\psi_{1s}(0)\psi_{2s}(0). \quad (7.104)$$

Используя явные выражения для водородоподобных волновых функций и соответствующих собственных энергий (при ядерном заряде  $Z = 2$ ), для коэффициента индуцированного сверхтонким взаимодействием смешивания  $\eta_{\text{He}}$  получаем

$$\eta_{\text{He}} = \frac{\langle g|H_{\text{hf}}|e\rangle}{E_{1s2s} - E_{1s1s}} = \frac{32}{3\sqrt{3}}\frac{\mu_0g_{\text{He}}\mu_N}{e^2a_0^2} = \frac{8}{3\sqrt{3}}g_{\text{He}}\alpha^2\frac{m_e}{m_p}. \quad (7.105)$$

**(в)** Пусть положение нейтрона  $\vec{R}$  в сферической системе координат имеет вид  $(R, \theta, \phi)$ . Примесь состояния  $1s2s\ ^3S_1$  создает в этой точке ненулевую намагничен-

ность, и в гамильтониан приходится вводить второй член, обусловленный контактным взаимодействием типа сверхтонкого<sup>1)</sup>:

$$H_n = -\frac{16\pi}{3} \mu_0 g_n \mu_N (\vec{s}_1 \cdot \vec{I}_n \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{R}) + \vec{s}_2 \cdot \vec{I}_n \delta^3(\vec{r}_2 - \vec{R})). \quad (7.106)$$

Квантовое состояние, учитывающее нейтрон (но до введения  $H_n$ ), имеет вид:

$$|\tilde{g}, m_{\text{He}}, m_n\rangle = (|g, m_{\text{He}}\rangle + \eta_{He} |e, m_{\text{He}}\rangle) |m_n\rangle,$$

где мы обозначили  $z$ -проекции  $\vec{I}_{\text{He}}$  и  $\vec{I}_n$  соответственно как  $m_{\text{He}}$  и  $m_n$ . Таким образом, в первом порядке энергия взаимодействия с нейтроном дается выражением:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \tilde{g}, m, m_n | H_n | \tilde{g}, m, m_n \rangle \approx 2\eta_{He} \langle e, m, m_n | H_n | g, m, m_n \rangle. \quad (7.107)$$

После алгебраических преобразований, аналогичных проведенным в п. (б), имеем

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{32\pi}{3\sqrt{3}} \eta_{He} \mu_0 \mu_N \psi_{1s}(R, \theta, \phi) \psi_{2s}(R, \theta, \phi) m_{\text{He}} m_n = J \vec{I}_{\text{He}} \cdot \vec{I}_n, \quad (7.108)$$

где  $J$  не зависит от углового положения  $(\theta, \varphi)$  нейтрона в силу изотропности волновых функций  $s$ -состояния. Записывая в явном виде водородоподобные волновые функции состояний  $1s$  и  $2s$ , мы находим:

$$J = -\frac{256}{27\sqrt{2}} \alpha^4 g_{\text{He}} g_n \left(\frac{m_e}{m_p}\right)^2 R_\infty \left(1 - \frac{R}{a_0}\right) e^{-3R/a_0}. \quad (7.109)$$

При  $R \sim 2a_0$ , используя значения  $g_{\text{He}} = -2,1$  и  $g_n = -3,8$ , находим, что  $J \sim 0,3$  Гц. В реальных молекулах эта величина может быть значительно большей, до  $J \sim \sim 300$  Гц. Это расхождение легко понять: наша (упрощенная) модель пренебрегает увеличением перекрытия электронных волновых функций и волновых функций второго ядра (в данном случае нейтрона) в результате кулоновского притяжения. И, наконец, заметим, что в нашей модели величина прямого диполь-дипольного взаимодействия может быть записана в виде

$$\langle H_d \rangle \sim \frac{g_{He} g_n \mu_N^2}{R^3} = \frac{1}{4(R/a_0)^3} \alpha^2 g_{He} g_n \left(\frac{m_e}{m_p}\right)^2 R_\infty. \quad (7.110)$$

Таким образом,

$$\frac{J}{\langle H_d \rangle} \sim -\frac{1024}{27\sqrt{2}} \alpha^2 \left(\frac{R}{a_0}\right)^3 \left(1 - \frac{R}{a_0}\right) e^{-3R/a_0} \sim 3 \cdot 10^{-5}. \quad (7.111)$$

Как уже говорилось, в реальных молекулах превышение величины  $J$  над сделанной нами оценкой может достигать трех порядков величины. Однако, даже в этих случаях, сила  $J$ -связи оказывается на 1–2 порядка величины слабее, чем прямое диполь-дипольное взаимодействие.

<sup>1)</sup> Отметим, что аналогично прямому диполь-дипольному взаимодействию двух ядерных спинов (7.95), бесконтактное взаимодействие спина нейтрона с индуцированным магнитным моментом атомной оболочки также обращается в ноль в результате вращения молекулы.

## Глава 8

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

#### 8.1. Отражение света от движущегося зеркала

(а) Пучок монохроматического света с длиной волны  $\lambda_0$  распространяется в вакууме под углом  $\varphi$  по отношению к вертикали. Часть этого пучка отражается полупрозрачным неподвижным зеркалом М1 (рис. 8.1) и направляется на удаленный фотодетектор. Часть пучка, прошедшая через М1, отражается на тот же самый фотодетектор горизонтальным зеркалом М2, движущимся в вертикальном направлении со скоростью  $v \ll c$ . Сигнал фотодетектора подается на спектроанализатор. Какие частотные компоненты будут при этом регистрироваться?

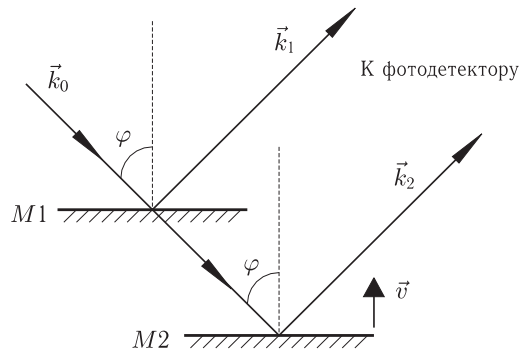


Рис. 8.1. Схема установки для задачи 8.1 (а). Падающий свет с волновым вектором  $\vec{k}_0$  отражается неподвижным зеркалом М1 (создавая свет с волновым вектором  $\vec{k}_1$ ) и движущимся зеркалом М2 (создавая свет с волновым вектором  $\vec{k}_2$ ). Два отраженных пучка направляются на фотодетектор. Фотодетектор усредняет сигнал по оптическим частотам, но может регистрировать частоту биений между двумя отраженными пучками

(б) Световой пучок (волновой вектор  $\vec{k}_{\text{in}}$ ) падает на поверхность зеркала под произвольным углом. Определить доплеровский сдвиг первого порядка для модуля волнового вектора ( $\Delta k = |\vec{k}_{\text{out}}| - |\vec{k}_{\text{in}}|$ ), обусловленный движением зеркала со скоростью  $\vec{v}$  (рис. 8.2).

#### Решение

(а) Для угловой частоты падающего света имеем  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ . При отражении от неподвижного зеркала М1 она не меняется. Чтобы найти частоту света, отраженного от зеркала М2, удобно сначала перейти в систему координат, движущуюся вместе

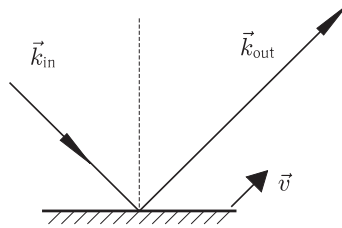


Рис. 8.2. Схема установки для задачи 8.1 (б). В этом случае мы рассматриваем одно зеркало, движущееся с произвольно направленной скоростью  $\vec{v}$

с М2. При переходе в систему координат, движущуюся со скоростью  $\vec{v}$ , наблюдаемая частота света изменяется на  $\Delta\omega$  за счет эффекта Доплера:

$$\Delta\omega = -\vec{k} \cdot \vec{v}. \quad (8.1)$$

Следовательно, в этой системе координат падающий свет имеет сдвинутую эффектом Доплера частоту

$$\omega_1 = \omega_0 \left( 1 + \frac{v}{c} \cos \varphi \right). \quad (8.2)$$

В этой системе координат отраженный свет имеет ту же частоту  $\omega_1$ , но при возвращении назад в лабораторную систему координат мы опять должны учесть доплеровский сдвиг (формула (8.1)). Угол между  $\vec{k}_2$  и  $\vec{v}$  равен  $\varphi$ , и возвращаясь назад в лабораторную систему координат, мы переходим в систему отсчета, движущуюся со скоростью  $-\vec{v}$ . Следовательно, для частоты света, отраженного от зеркала М2, в лабораторной системе координат имеем

$$\omega_2 = \omega_1 \left( 1 + \frac{v}{c} \cos \varphi \right) \approx \omega_0 \left( 1 + \frac{2v}{c} \cos \varphi \right), \quad (8.3)$$

где мы пренебрегли членами, квадратичными по  $(v/c)$ . Если фотодетектор производит усреднение по оптическим частотам, то спектроанализатор выделит постоянную составляющую интенсивности и компоненту на частоте

$$\omega_2 - \omega_0 \approx 2k_0 v \cos \varphi = 2\omega_0 \frac{v}{c} \cos \varphi, \quad (8.4)$$

где  $k_0$  — модуль волнового вектора падающего света.

Заметим, что физическую картину сдвига частоты при отражении света от движущегося зеркала можно использовать для понимания принципа действия устройства *акустооптического сдвига частоты*. В этом устройстве роль движущегося зеркала играет бегущая звуковая волна, от которой отражается свет.

**(б)** В системе координат, движущейся вместе с зеркалом, в соответствии с формулой (8.1), частота падающего света сдвигается на

$$\Delta\omega = -\vec{k}_{\text{in}} \cdot \vec{v}. \quad (8.5)$$

Отраженная волна в движущейся системе координат имеет ту же частоту, но когда мы переходим назад в лабораторную систему координат, возникает дополнительный доплеровский сдвиг

$$\Delta\omega' = \vec{k}_{\text{out}} \cdot \vec{v}, \quad (8.6)$$

и полный сдвиг частоты составит

$$\Delta\omega + \Delta\omega' = (\vec{k}_{\text{out}} - \vec{k}_{\text{in}}) \cdot \vec{v}, \quad (8.7)$$

а модуль волнового вектора меняется на

$$\Delta k = \frac{\Delta \vec{k} \cdot \vec{v}}{c}, \quad (8.8)$$

где  $\Delta \vec{k} = \vec{k}_{\text{out}} - \vec{k}_{\text{in}}$ .

Этот результат используется в задаче 8.14 при анализе гироскопов, основанных на эффекте Саньяка.

## 8.2. Лазерный нагрев малой частицы

Рассмотрим взаимодействие света длиной волны  $\lambda$  с малой сферической металлической частицей радиуса  $a$  ( $ka \ll 1$ , где  $k = 2\pi/\lambda$ ). Оценить энергию, поглощаемую частицей в единицу времени.

Для решения этой задачи нужно предложить простую модель, которая описывает основной физический механизм, приводящий к нагреву. Рассмотреть зависимость поглощенной энергии от размера частицы и частоты света.

Сделать численные оценки для случая частиц серебра при  $a = 1$  мкм,  $\lambda = 10$  мкм и полной энергии светового импульса  $E = 1$  Дж, при поперечном сечении луча  $A = 1$  см<sup>2</sup> и длительности импульса  $\tau = 10$  нс. До какой температуры разогреются частицы к концу импульса? Считать распределение тепла по объему частицы равномерным<sup>1)</sup>.

### Подсказка

Прежде всего, заметим, что из-за малого размера металлической частицы ( $ka \ll 1$ ), мы можем принять, что она помещена в квазистационарные электрическое и магнитное поля. Электрическое поле световой волны внутри проводника компенсируется перераспределением заряда, которое не вызывает длительных токовых возбуждений и, следовательно, вызывает очень слабый нагрев. С другой стороны, для компенсации магнитного поля световой волны требуется квазинепрерывный ток. Из-за наличия у металла электрического сопротивления это приводит к нагреву частицы.

<sup>1)</sup> Предположение о равномерном распределении тепла по объему частицы является оправданным, поскольку характерное время температурной диффузии (см., например, [Baierlein (1999), гл. 15] составляет

$$t_d = \frac{c_p \rho_d}{\kappa_t} \cdot a^2 \approx 6 \cdot 10^{-9} \text{ с} < \tau.$$

Здесь  $\kappa_t \approx 4$  Вт/(см · К) — теплопроводность серебра,  $c_p$  — удельная теплоемкость, а  $\rho_d$  — плотность серебра, приведенная в этой задаче ниже.



Для решения этой задачи важным является понятие *глубины скин-слоя* (т. е. глубина, на которую магнитное поле проникает внутрь металла), определяемой выражением (см., например, [Griffiths (1999)] или [Jackson (1975)]):

$$\delta = \sqrt{\frac{c^2 \rho}{2\pi\mu\omega}}. \quad (8.9)$$

Здесь  $\rho$  — удельное сопротивление,  $\mu$  — магнитная восприимчивость (для немагнитных материалов  $\mu \approx 1$ ) и  $\omega$  — частота электромагнитного поля. Для серебра имеем

$$\rho \approx 1,47 \cdot 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см} \approx 1,63 \cdot 10^{-18} \text{ CGS}. \quad (8.10)$$

Чтобы численно оценить нагрев частицы серебра, нужно использовать значение удельной теплоемкости  $c_p$  серебра в актуальном интервале температур, которое составляет

$$c_p \approx 0,24 \frac{\text{Дж}}{\text{г} \cdot \text{К}}, \quad (8.11)$$

а также значение плотности серебра

$$\rho_d \approx 10,5 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}. \quad (8.12)$$

### Решение

Согласно формуле (8.9), для глубины скин-слоя серебра имеем

$$\delta \approx 1,1 \cdot 10^{-6} \text{ см} \ll a. \quad (8.13)$$

Так что магнитное поле действительно не проникает в глубину металлической частицы, и магнитное поле световой волны компенсируется индуцированным поверхностным током. Мы будем рассматривать энергию, выделившуюся в частице, как резистивный нагрев, связанный с этим током.

Как говорилось в подсказке, поскольку  $ka \ll 1$ , мы можем считать, что частица помещена в однородное квазистационарное магнитное поле. Для индуцированного магнитного момента [Griffiths (1999)] имеем:

$$m = \frac{a^3}{2} \cdot B = \frac{\pi a^2 i}{c}, \quad (8.14)$$

где  $B$  — магнитное поле световой волны. В выражении (8.14) мы ввели «эффективный петлевой ток»  $i = cBa/(2\pi)$ , который создает тот же магнитный дипольный момент в круговой петле радиуса  $a$ <sup>1)</sup>.

На завершающем шаге нашей оценки мы рассчитаем эффективное сопротивление  $R$ . Площадь поперечного сечения тока составляет  $\approx \delta a$ , а средняя длина петли

<sup>1)</sup> В формуле (8.14) мы используем тот факт, что магнитная поляризуемость проводящей сферы равна  $a^3/2$ . Это может быть выведено подобно тому, как это было сделано в задаче 2.1 для получения электрической поляризуемости проводящей сферы. Полное магнитное поле вне сферы является суммой внешнего однородного поля  $B$  и поля индуцированного диполя. Нормальная к поверхности сферы составляющая поля должна быть равна нулю, потому что внутри сферы поле равно нулю, а нормальная компонента поля непрерывна при пересечении поверхности. Это приводит к желаемому результату в отношении поляризуемости.

тока вокруг частицы  $\approx \pi a$ . Отсюда получаем  $R \approx \rho\pi/\delta$ , и для выделенной на частице мощности имеем:

$$P = i^2 R \approx \frac{(cBa)^2 \rho}{4\pi\delta}. \quad (8.15)$$

Используя формулу (8.9) для  $\delta$  и выражая магнитное поле световой волны через параметры лазерного пучка,

$$c \frac{B^2}{4\pi} = \frac{E}{\tau A}, \quad (8.16)$$

мы получаем

$$P \approx \frac{ca^2 \rho}{\delta} \frac{E}{\tau A} = \sqrt{2\pi\mu\omega\rho} \frac{a^2 E}{\tau A}. \quad (8.17)$$

Выражение (8.17) показывает, что эта мощность растет как корень квадратный из частоты световой волны (обратно пропорционально толщине скин-слоя). Нужно, однако, заметить, что характер скин-эффекта в металлах меняется на частотах, соответствующих длинам волн менее  $\approx 10$  мкм (см., например, [Born и Wolf (1980), гл. 13.2]) когда толщина скин-слоя становится сопоставимой с характерной длиной рассеяния электронов в металле и данная модель оказывается неприменимой.

Выражение (8.17) также показывает, что поглощенная мощность зависит линейно от геометрического сечения частицы ( $\propto a^2$ ). Эта зависимость радикальным образом отличается от поведения энергии, *рассеиваемой* частицей, которое описывается законом  $a^6$  (пропорционально квадрату индуцированного электрического дипольного момента).

Численное значение поглощенной мощности для заданных параметров составляет  $P \approx 4 \cdot 10^{-2}$  Вт, а полная поглощенная энергия за импульс  $Q \approx 4 \cdot 10^{-10}$  Дж.

Считая, что тепло равномерно распределяется по объему частицы, для изменения температуры частицы мы имеем

$$\Delta T = \frac{Q}{c_p m} \approx 40 \text{ K}, \quad (8.18)$$

где  $c_p$  — удельная теплоемкость, а  $m \approx 4,4 \cdot 10^{-11}$  г — масса частицы.

### 8.3. Спектр частотно-модулированного света

Рассмотрим поле  $\mathcal{E}(t)$ , осциллирующее на центральной частоте  $\omega_0$ , которая модулируется с частотой  $\Omega$  с глубиной модуляции  $m\Omega$  ( $m$  — индекс модуляции)

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp[i\omega_0 t + im \sin \Omega t]. \quad (8.19)$$

Пользуясь известным тождеством для бесселевых функций (см., например, [Siegman (1986), раздел 27.7])

$$e^{im \sin \Omega t} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(m) e^{ik\Omega t}, \quad (8.20)$$

мы можем представить спектр поля в виде суммы частотных компонент (*боковых частот*), относительные амплитуды которых описываются функциями Бесселя  $J_k(m)$ .

Описать качественно изменения спектра мощности частотно-модулированного света с изменением величины индекса модуляции от малой ( $m \ll 1$ ) до большой ( $m \gg 1$ ).

### Решение

В соответствии с тождеством (8.20), мы имеем

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp[i\omega_0 t + im \sin \Omega t] = \mathcal{E}_0 e^{i\omega_0 t} \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(m) e^{ik\Omega t}. \quad (8.21)$$

Когда индекс модуляции мал (рис. 8.3, *а*), наблюдается две боковых частоты (каждая из которых содержит  $\approx (m/2)^2$  от полной энергии), отделенных от несущей частоты на  $\pm\Omega$ ; при этом амплитуды других боковых частот пренебрежимо малы. По мере того как  $m$  растет (рис. 8.3, *б*), начинают приобретать вес другие боковые частоты, а центральный пик уменьшается. И наконец, при больших значениях  $m$  (рис. 8.3, *в*)

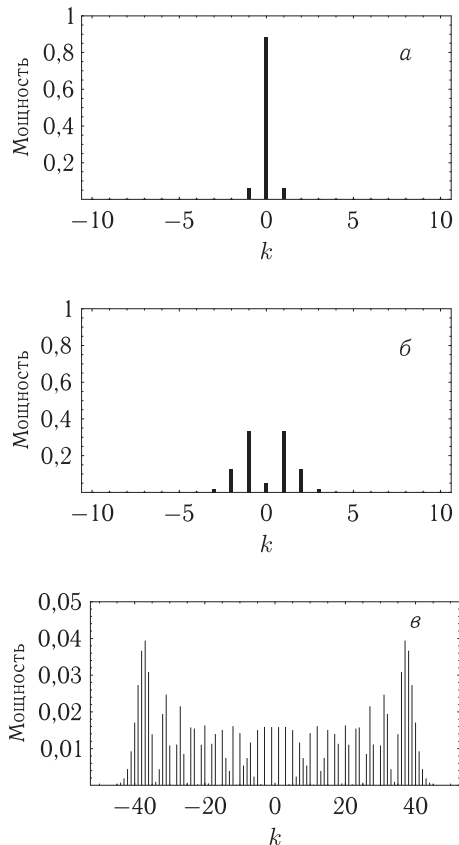


Рис. 8.3. Спектр мощности частотно-модулированного поля. Высота  $k$ -й частотной компоненты определяется значением  $|J_k(m)|^2$ : (*а*)  $m = 0,4$ , (*б*)  $m = 2$ , (*в*)  $m = 40$  (обратить внимание на различие масштабов и по вертикальной, и по горизонтальной осям)

боковые частоты проявляются во всем диапазоне от  $\omega - m\Omega$  до  $\omega + m\Omega$  при максимальной мощности компонент, находящихся вблизи краев диапазона.

Качественное объяснение такого поведения легко получить из временной картины частотной модуляции. Большой индекс модуляции отвечает большой глубине частотной модуляции. Когда частота осциллирует во времени, она проводит максимальное время вблизи точек поворота, тем самым выделяя максимальную мощность на крайних частотных компонентах.

Такое качественное изменение характера спектра напоминает переход от квантового гармонического осциллятора к классическому. Основное состояние осциллятора соответствует максимальной плотности волновой функции вблизи точки равновесия, тогда как классический осциллятор, который можно рассматривать как когерентную суперпозицию большого числа квантовых возбуждений, имеет максимальную усредненную по времени плотность вблизи точек поворота.

#### 8.4. Удвоение частоты модулированного света

Рассмотрим устройство для удвоения частоты света, например, удвоитель частоты лазерного излучения на нелинейном кристалле. Если на вход устройства подается монохроматическое излучение частоты  $\omega$ , то на выходе мы имеем монохроматическое излучение частоты  $2\omega$  с интенсивностью, пропорциональной квадрату интенсивности на входе. Допустим теперь, что входное излучение модулируется на частоте  $\Omega$ , так что его спектр характеризуется не только *несущей* частотой  $\omega$ , но и боковыми частотами на комбинационных частотах.

Как выглядит частотный спектр (значения частот и относительные интенсивности спектральных компонент) на выходе удвоителя? Считать, что ширина полосы удвоителя частоты достаточно велика, чтобы захватить все актуальные частотные компоненты. Рассмотреть случаи слабой амплитудной и частотной модуляции входного излучения (когда боковые частоты первого порядка много слабее несущей частоты, а интенсивности боковых частот высших порядков, для случая частотной модуляции, пренебрежимо малы).

##### Решение

На выходе удвоителя будут содержаться пики несущей частоты  $2\omega$  и боковых частот  $2\omega \pm \Omega$ , т.е. несущая частота удваивается, а расстояние между несущей частотой и боковыми частотами остается неизменным.

Существует несколько способов понять это. Один из них состоит в том, чтобы рассмотреть модуляцию во временной области. В случае амплитудной (частотной) модуляции, когда входной пучок достигает максимальной интенсивности (частоты), то же самое происходит и с выходным пучком, и эти изменения происходят с той же периодичностью, определяемой частотой  $\Omega$ .

Другая картина базируется на эффекте смешения частот. Когда на входе присутствует более одной частотной компоненты, удвоитель смешивает все комбинации входных частот, что приводит не только к удвоению несущей частоты и боковых частот (результатом последнего, в условиях слабой модуляции, являются боковые частоты пренебрежимо малой интенсивности), но также и к генерации излучения на суммарных частотах несущей и каждой из боковых частот. Именно этим суммарным частотам соответствуют доминирующие боковые компоненты на выходе.

Обратимся теперь к обсуждению интенсивностей боковых частот по отношению к несущей. Мы увидим, что для слабой модуляции, как амплитудной, так и частотной, отношение амплитуды каждой из боковых частот к амплитуде несущей на выходе удвоителя вдвое отличается от этого отношения на входе (что преобразуется во множитель 4 для отношения соответствующих интенсивностей).

Это видно особенно ясно в случае амплитудной модуляции. Электрическое поле на выходе удвоителя имеет вид:

$$\mathcal{E}_{\text{out}} \propto \mathcal{E}_{\text{in}}^2 \propto [(1 + \epsilon \sin \Omega t) e^{i\omega t}]^2 \approx (1 + 2\epsilon \sin \Omega t) e^{2i\omega t}, \quad (8.22)$$

где  $\epsilon$  — коэффициент модуляции. Из последнего выражения в (8.22) следует, что относительная амплитуда боковых частот на выходе вдвое больше, чем на входе.

Рассмотрим теперь случай частотной модуляции. Мгновенную частоту входного излучения можно записать в виде

$$\omega_{\text{inst}} = \omega(1 + \alpha \sin \Omega t), \quad (8.23)$$

где  $\alpha \ll 1$  — коэффициент, характеризующий глубину модуляции. Фазу  $\phi(t)$  поля можно найти путем интегрирования частоты (8.23) по времени. С точностью до постоянного фазового сдвига, мы можем записать электрическое поле на входе в виде

$$\mathcal{E}_{\text{in}}(t) = \mathcal{E}_0 e^{i\phi} + \text{c.c.} = \mathcal{E}_0 \exp \left[ i\omega \left( t - \frac{\alpha}{\Omega} \cos \Omega t \right) \right] + \text{c. c.}, \quad (8.24)$$

где  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда поля<sup>1)</sup>.

Амплитуды частотных компонент, соответствующих полю (8.24), определяются функциям Бесселя  $J_k(m)$  (см. задачу 8.3), где  $m \equiv \alpha\omega/\Omega$  — индекс фазовой модуляции (как видно из формул (8.23) и (8.24), фазовая модуляция фактически эквивалентна модуляции частотной), а  $k$  — номер боковой частоты:  $k = 0$  для несущей и  $k = \pm 1$  для интересующих нас частот. Анализируя выражения (8.23) и (8.24) и используя тот факт, что частота модуляции  $\Omega$  — одна и та же на входе и на выходе удвоителя, мы приходим к выводу, что  $m$  увеличивается вдвое (при удвоении частоты мы имеем  $\omega \rightarrow 2\omega$ ,  $\alpha \rightarrow \alpha$ ,  $\Omega \rightarrow \Omega$ ,  $m \rightarrow 2m$ ), что, в соответствии со свойствами функций Бесселя, преобразуется в удвоение относительной амплитуды боковых частот на выходе удвоителя.

Разумеется, в точности такие же результаты получаются при решении задачи в терминах смещения частот за счет нелинейной оптической восприимчивости  $\chi^{(2)}$  (см., например, [Boyd (2003)]).

## 8.5. Звон расстроенного резонатора

Техника *спектроскопии затухания резонатора* (СЗР) включает в себя возбуждение резонансной моды (или мод) высокочастотного оптического резонатора, прерывание входного пучка и наблюдение экспоненциального затухания выходной интенсивности. Поскольку скорость затухания определяется внутрирезонаторными

<sup>1)</sup> Мы предупреждаем читателя от распространенной ошибки: зависящее от времени электрическое поле (8.24) не эквивалентно полю вида  $E_0 \exp[i\omega[1 + \alpha' \cos \Omega t]t] + \text{c. c.}$  Последняя форма не соответствует гармонической модуляции частоты.

потерями, этот метод позволяет реализовать высокую чувствительность измерения внутрирезонаторных потерь и одновременно является свободным от фоновых помех. Он широко использовался для определения резонаторных потерь (подобных потерям, определяемым коэффициентами отражения зеркал [Anderson и др. (1984)]), и для детектирования следов атомных и молекулярных примесей (см., например, работу [Ye и Hall (2000)] и ссылки в ней).

Рассмотрим монохроматический свет, падающий на двухзеркальный резонатор.

(а) Предполагая, что потери резонатора определяются коэффициентами отражения зеркал ( $R_i$ ,  $i = 1, 2$ ;  $\delta_i = 1 - R_i \ll 1$ ), найти интенсивностную скорость затухания резонатора  $\gamma_{rd}$ . Длина резонатора —  $L$ . Рассмотреть зависимость (или ее отсутствие) времени затухания резонатора от отстройки частоты света от собственной частоты резонатора.

(б) Пусть выходное излучение резонатора, который был возбужден монохроматическим светом (не обязательно резонансным частоте резонаторной моды), поступает на спектрометр высокого разрешения, вход которого открывается только после того, как входной пучок резонатора прерывается. Какой спектр излучения будет регистрироваться при затухании резонатора?

### Решение

(а) Эту задачу удобно решать, пользуясь фотонной картиной поля. Фотон, попавший внутрь резонатора, имеет вероятность выхода из резонатора  $\delta_1$  или  $\delta_2$  при столкновении с соответствующим зеркалом. За один полный проход по резонатору, длительностью  $2L/c$ , вероятность ухода из резонатора составляет приблизительно  $\delta = \delta_1 + \delta_2$ . Таким образом, скорость затухания дается выражением

$$\gamma_{rd} = \frac{\delta c}{2L}, \quad (8.25)$$

независимо от расстройки частоты излучения от резонанса. Это обстоятельство часто используется для того, чтобы эффективно прерывать входной пучок путем выведения резонатора из резонанса быстрым перемещением одного из его зеркал.

(б) Регистрируемый спектр будет представлять собой лоренциан (возникающий как Фурье-образ экспоненциального затухания) с шириной (полной шириной на полувысоте)  $\delta\omega = \gamma_{rd}$ , центрированный на частоте входного излучения.

Отметим, что поведение оптического резонатора отличается от поведения электронного LRC-контура или гитарной струны. Если на такой осциллятор воздействует нерезонансная частота, и действие резко обрывается, то контур продолжает осциллировать на своей резонансной частоте (или частотах, в случае струны) в процессе затухания.

## 8.6. Пропускание света световодом

Рассмотрим световод, состоящий из цилиндрической сердцевины с показателем преломления  $n_1$ , окруженный оболочкой с показателем преломления  $n_2$ , где  $n_2 < n_1$  (это — обычная конфигурация волоконно-оптических кабелей).

Концы световода срезаны перпендикулярно его оси и отполированы. Точечный источник света помещен вблизи одного из концов волновода. Какая доля полного светового потока, испускаемого источником, проходит до другого конца волновода?

**Решение**

Сначала найдем угол приема  $\alpha$  световода (пренебрегая потерями на отражение на входе). На первой поверхности, где свет входит в световод, из закона Снелля мы имеем (рис. 8.4):

$$\sin \alpha = n_1 \sin \beta. \quad (8.26)$$

Чтобы свет прошел через световод, нужно чтобы величина  $\varphi = \pi/2 - \beta$  была равна или больше критического угла для полного внутреннего отражения  $[\sin^{-1}(n_2/n_1)]$ . После простых тригонометрических преобразований для этих условий получаем

$$\sin \beta \leq \frac{\sqrt{n_1^2 - n_2^2}}{n_1}; \quad (8.27)$$

комбинируя выражения (8.26) и (8.27), имеем:

$$\sin \alpha \leq \sqrt{n_1^2 - n_2^2}. \quad (8.28)$$

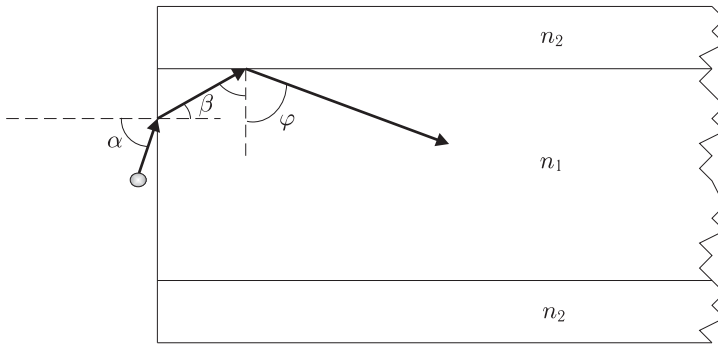


Рис. 8.4. Схематическое изображение световода

Следующим шагом мы рассчитаем телесный угол света, принимаемого световодом:

$$\Delta\Omega = 2\pi \int_0^{\alpha_m} \sin \theta \, d\theta = 2\pi(1 - \cos \alpha_m), \quad (8.29)$$

где  $\alpha_m = \sin^{-1} \sqrt{n_1^2 - n_2^2}$ .

После деления на телесный угол ( $2\pi$ ), описывающий свет, падающий на вход световода, мы получаем долю  $T$  полного света, пропущенного сердцевинкой к концу световода<sup>1)</sup>:

$$T = 1 - \cos \alpha_m, \quad (8.30)$$

<sup>1)</sup> В этом рассмотрении авторы пренебрегли отражением света при входе в световод, что приводит к завышению пропускания, особенно для больших углов падения  $\alpha$ . (См. авторский список поправок <http://socrates.berkeley.edu/budker>.)

где  $\cos \alpha_m$  связан с показателями преломления  $n_2$  и  $n_1$  соотношением

$$\cos \alpha_m = \sqrt{1 + n_2^2 - n_1^2}. \quad (8.31)$$

Из выражения (8.30), а также из того, что  $n_1 > n_2$  и  $\cos \alpha_m$  — величина вещественная, мы видим, что максимальное пропускание  $T = 1$  достигается при

$$n_2 = \sqrt{n_1^2 - 1}. \quad (8.32)$$

## 8.7. Квантовые флуктуации световых полей

В каждом конкретном эксперименте обычно существует множество технических источников шумов, вносящих вклад в неопределенность определения интересующей нас величины. В принципе, однако, все эти источники шумов могут быть исключены до уровня, когда шумы измерения полностью определяются квантовыми флуктуациями (это известно как *стандартный квантовый предел*, см. также задачу 8.9).

Таким образом, предельная точность, с которой может быть проведено измерение, управляется принципом неопределенности Гейзенберга. В общем случае, если две наблюдаемых описываются *операторами*  $A$  и  $B$ , то дисперсии  $(\Delta A)^2$  и  $(\Delta B)^2$  подчиняются соотношению

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2, \quad (8.33)$$

где  $\langle \dots \rangle$  обозначает среднее значение,  $[A, B]$  — коммутатор  $A$  и  $B$ , и *стандартное отклонение*  $\Delta A$  наблюдаемой  $A$  дается выражением

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (8.34)$$

Как принцип неопределенности Гейзенберга ограничивает точность оптических измерений? Оказывается, что когда электромагнитное поле квантовано (см. задачу 3.2), операторы, описывающие ортогональные компоненты оптического поля, не коммутируют и, следовательно, подчиняются соотношению неопределенности.

**(а)** Рассмотрим электромагнитные поля заданной моды, которые описываются операторами  $\mathcal{E}_c$  и  $\mathcal{E}_s$ , где

$$\mathcal{E}_c = \frac{\mathcal{E}_0}{2} (a + a^\dagger), \quad (8.35)$$

$$\mathcal{E}_s = \frac{\mathcal{E}_0}{2i} (a - a^\dagger). \quad (8.36)$$

Здесь  $a$  и  $a^\dagger$  — операторы рождения и уничтожения,

$$\mathcal{E}_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \quad (8.37)$$

— однофотонная амплитуда электрического поля ( $V$  — нормирующий объем, см. задачу 3.2), и мы принимаем общую фазу поля  $(kz - \omega t)$  равной нулю.



Найти соотношение неопределенности между ортогональными компонентами оптического поля  $\mathcal{E}_c$  и  $\mathcal{E}_s$ .

**(б)** *Когерентные состояния* одномодового поля излучения  $|\alpha\rangle$ , которые могут быть получены с помощью лазеров, представляют собой «классические» электромагнитные поля и являются собственными состояниями оператора уничтожения фотона  $\alpha$  (введенного в задаче 3.2), т. е.

$$a|\alpha\rangle = |\alpha|e^{i\phi}|\alpha\rangle, \quad (8.38)$$

где  $|\alpha|$  — амплитуда поля (в единицах  $\mathcal{E}_0$ ), а  $\phi$  — его фаза. Обычный вакуум это также когерентное состояние с собственным значением, равным нулю.

Мы видим, что для когерентного поля средние значения операторов  $\mathcal{E}_c$  и  $\mathcal{E}_s$  равны

$$\langle \mathcal{E}_c \rangle = \langle \alpha | \mathcal{E}_c | \alpha \rangle = \mathcal{E}_0 |\alpha| \cos \phi, \quad (8.39)$$

$$\langle \mathcal{E}_s \rangle = \langle \alpha | \mathcal{E}_s | \alpha \rangle = \mathcal{E}_0 |\alpha| \sin \phi. \quad (8.40)$$

Используя выражение (8.34) и приемы, разработанные в задаче 3.2, найти дисперсию числа фотонов в когерентном состоянии.

### Решение

**(а)** Согласно (8.33) соотношение неопределенности для  $\mathcal{E}_c$  и  $\mathcal{E}_s$  может быть записано через коммутатор:

$$[\mathcal{E}_c, \mathcal{E}_s] = \frac{\mathcal{E}_0^2}{4i} ([a, a] - [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a] - [a^\dagger, a^\dagger]) = i \frac{\mathcal{E}_0^2}{2}, \quad (8.41)$$

где мы использовали тот факт, что  $[a, a^\dagger] = -[a^\dagger, a] = 1$ , а  $[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$ . Таким образом мы получаем (используя (8.33)):

$$(\Delta \mathcal{E}_c)^2 (\Delta \mathcal{E}_s)^2 \geq \frac{\mathcal{E}_0^4}{16}. \quad (8.42)$$

Состояние, для которого соотношение (8.42) выполняется в форме равенства, называют *состоянием минимальной неопределенности*.

**(б)** Согласно (8.34), дисперсия числа фотонов  $(\Delta n)^2$  в заданной моде электромагнитного поля, в когерентном состоянии  $|\alpha\rangle$ , имеет вид

$$(\Delta n)^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2, \quad (8.43)$$

где  $n = a^\dagger a$  — оператор числа фотонов, рассмотренный в задаче 3.2. Мы имеем

$$\langle n \rangle = \langle \alpha | n | \alpha \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2, \quad (8.44)$$

и

$$\langle n^2 \rangle = \langle \alpha | n^2 | \alpha \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a a^\dagger a | \alpha \rangle = \langle \alpha | a^\dagger (1 + a^\dagger a) a | \alpha \rangle = |\alpha|^2 + |\alpha|^4. \quad (8.45)$$

Используя (8.44), можно переписать выражение (8.45) в виде

$$\langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2 + \langle n \rangle. \quad (8.46)$$

Таким образом, из выражений (8.44), (8.45) и (8.46) мы получаем результат, ожидаемый для пуассоновской статистики:

$$\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}. \quad (8.47)$$

Эта величина известна также как *дробовой предел*.

Теперь ясно, как принцип неопределенности Гейзенберга ограничивает точность оптических измерений. На рис. 8.5 показано фазовое представление ортогональных компонент оптического электрического поля для когерентных состояний. Мы видим, что когерентное состояние характеризуется как неопределенностью фазы, так и неопределенностью амплитуды, вследствие квантовых флуктуаций. Даже когда амплитуда поля равна нулю, продолжают существовать квантовые флуктуации, связанные с энергией нулевых колебаний квантованного электромагнитного поля (задача 3.2). Отметим, что квантовые флуктуации когерентного поля не зависят от его амплитуды (формула (8.42))<sup>1)</sup>.

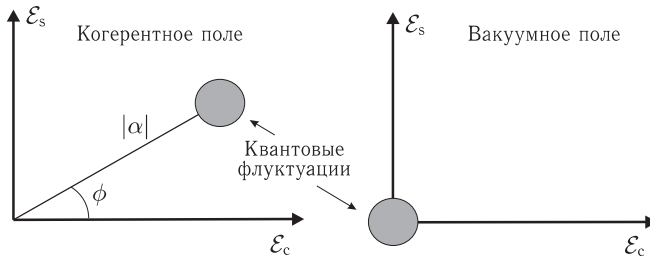


Рис. 8.5. Фазовые диаграммы когерентных состояний. На левом графике представлено когерентное электромагнитное поле амплитуды  $|\alpha|$  с фазой  $\phi$ . На правом графике представлено вакуумное поле. Серые диски изображают квантовые флуктуации, возникающие в результате того, что операторы, соответствующие ортогональным компонентам электромагнитного поля, не коммутируют

Хотя соотношение Гейзенберга (8.42) устанавливает минимальное значение произведения дисперсий  $(\Delta E_c)^2$  и  $(\Delta E_s)^2$ , существует возможность создания состояний, удовлетворяющих соотношению неопределенности асимметричным образом. Такие состояния называются *сжатыми* [Caves (1981)]. На рис. 8.6 показаны фазовые диаграммы сжатых состояний, когда неопределенность амплитуды снижена по сравнению с уровнем дробового шума (сжатие по числу фотонов) и когда неопределенность фазы снижена до субдробового уровня (сжатие по фазе).

Примерно за последние 20 лет был достигнут значительный прогресс в технике получения сжатых состояний света (см., например, [Loudon и Knight (1987)] и [Walls и Milldurn (1995)]). В общем случае нелинейное оптическое взаимодействие модифицирует шумовые свойства света. Примером этого может служить эффект генерации второй гармоники, который эффективно удаляет из пучка большие амплитудные флуктуации, поскольку эффективность процесса генерации второй гармоники растет с интенсивностью света. Если нелинейное взаимодействие является

<sup>1)</sup> Речь идет о неизменности флуктуаций поля. Флуктуации интенсивности описываются формулой (8.47), будучи пропорциональны корню из интенсивности. — *Примеч. ред.*

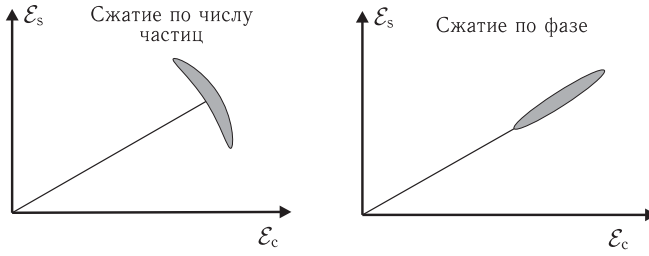


Рис. 8.6. Фазовое представление квантовых флуктуаций для сжатых состояний. Левый график показывает сжатие по числу частиц, а правый — сжатие по фазе. Для состояний минимальной неопределенности площадь пятна квантовых флуктуаций на фазовой диаграмме остается такой же, как и для когерентных состояний (рис. 8.5), происходит лишь перераспределение квантовых флуктуаций между ортогональными компонентами

фазочувствительным (например, если усиление зависит от фазы оптического поля по отношению к фазе поляризации среды), может быть получен сжатый свет. Таким образом, оказывается, что множество нелинейных оптических процессов, таких, как четырехволновое смещение, генерация второй гармоники, параметрическое усиление или самоиндуцированное вращение эллипса поляризации, способны приводить к созданию сжатого света.

## 8.8. Шум светоделителя

Рассмотрим идеальный светоделитель, который делит падающий световой пучок на две равные части. Если падающее световое поле находится в когерентном состоянии со средним числом фотонов  $\langle n \rangle$ , то, как видно из п. (б) задачи 8.7, стандартное отклонение этого числа фотонов составляет  $\sqrt{\langle n \rangle}$ . Каждый из двух выходных пучков имеет среднее число фотонов  $\langle n \rangle/2$ .

Поскольку число фотонов в каждом пучке уменьшилось вдвое по сравнению с входным пучком, амплитуда электрического поля в каждом пучке равна  $\mathcal{E}_{in}/\sqrt{2}$ , где  $\mathcal{E}_{in}$  — амплитуда электрического поля на входе. Если мы скажем, что светоделитель точно таким же образом действует и на флуктуации электрического поля, т. е.

$$\mathcal{E}_{in} \pm \Delta\mathcal{E} \rightarrow \frac{\mathcal{E}_{in}}{\sqrt{2}} \pm \frac{\Delta\mathcal{E}}{\sqrt{2}}, \quad (8.48)$$

то для числа фотонов  $n'$  в каждом из выходных пучков мы будем иметь

$$n' \propto \left( \frac{\mathcal{E}_{in}}{\sqrt{2}} \pm \frac{\Delta\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \right)^2 \approx \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{in}^2 \pm 2\mathcal{E}_{in}\Delta\mathcal{E}) \propto \frac{\langle n \rangle}{2} \pm \frac{\sqrt{\langle n \rangle}}{2}. \quad (8.49)$$

Однако интуиция нам справедливо подсказывает, что два выходных пучка находятся в когерентных состояниях, для которых флуктуации равны  $\sqrt{\langle n \rangle}/2$ , что в  $\sqrt{2}$  раз меньше, чем это следует из выражения (8.49).

Каково же происхождение дополнительного шума, который делает состояния выходных пучков когерентными?

Корректный ответ на этот вопрос был впервые дан в [Carves (1980)].

### Решение

Поскольку падающее световое поле находится в когерентном состоянии со средним числом фотонов  $\langle n \rangle \propto \langle \mathcal{E}_{in}^2 \rangle$ , где  $\mathcal{E}_{in}$  — электрическое поле световой волны на входе, то шум пучка, обусловленный квантовыми флуктуациями, дается выражением

$$\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle} \propto 2\mathcal{E}_{in}\Delta\mathcal{E}, \quad (8.50)$$

где  $\Delta\mathcal{E}$  описывает квантовые флуктуации входного пучка (и, как отмечалось в задаче 8.7, не зависит от  $\mathcal{E}_{in}$ ). Поскольку мы в действительности видим, что флуктуации числа фотонов в выходных пучках составляют  $\sqrt{\langle n \rangle/2}$ , то, в соответствии с ожидаемой величиной шума для когерентного света, светоделитель должен вносить дополнительный вклад в шумы выходных пучков. Этот лишний шум поступает через *темновой вход* светоделителя (рис. 8.7), куда входят вакуумные флуктуации. Ваку-

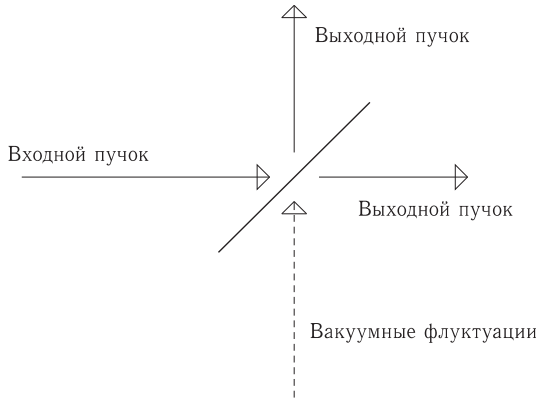


Рис. 8.7. Схема светоделителя

умные флуктуации имеют ту же величину, что и флуктуации когерентного пучка (см. задачу 8.7) и некоррелированы с флуктуациями входного пучка. Вакуумные флуктуации тоже делятся светоделителем на  $\sqrt{2}$ . Добавляя эти вклады в шум выходных пучков (в квадрате), мы находим

$$\Delta\mathcal{E}_{out} = \sqrt{\frac{\Delta\mathcal{E}^2}{2} + \frac{\Delta\mathcal{E}^2}{2}}. \quad (8.51)$$

Следовательно, квантовые флуктуации электромагнитного поля на входе и выходе светоделителя одинаковы:  $\Delta\mathcal{E}_{out} = \Delta\mathcal{E}$ . Таким образом, квантовые флуктуации числа фотонов соответствуют квантовым флуктуациям когерентного света, т. е.

$$(\Delta n')^2 = \frac{\langle n \rangle}{2} = \langle n' \rangle. \quad (8.52)$$

В экспериментах, использующих сжатые состояния света (см. задачу 8.7), очень важно иметь фотодетектор с максимальным квантовым выходом. Неидеальный детектор можно рассматривать как идеальный детектор, перед которым расположен светоделитель. Светоделитель, как мы видели выше, вносит дополнительный шум, проникающий через темновой вход, и тем самым уменьшает степень снижения шума, достигнутую сжатием.

## 8.9. Дробовой шум фотонов в поляриметрии

Линейно поляризованный световой пучок падает на поляриметр, включающий в себя идеальный поляризационный светоделитель (ПСД) и два фотодетектора со 100-процентным квантовым выходом, считающие фотоны в двух выходных пучках ПСД (рис. 8.8). Допустим, что мы хотим использовать сигналы фотодетекторов для определения угла  $\varphi$  между плоскостью поляризации света и осью ПСД. Выразить угол  $\varphi$  и его неопределенность  $\delta\varphi$  через число фотонов, зарегистрированных детекторами ( $N_1$  и  $N_2$ , соответственно, при  $N_1, N_2 \gg 1$ ). Считать, что доминирующим шумом является шум дробовой.

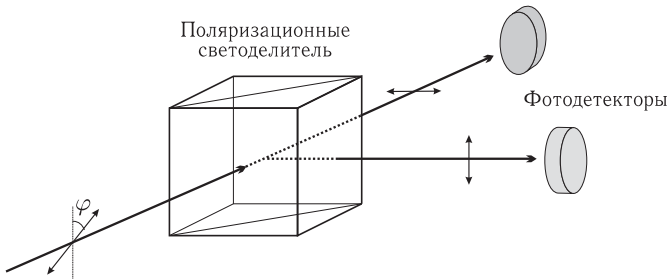


Рис. 8.8. Измерение угла  $\varphi$  между плоскостью поляризации света и осью поляризационного светоделителя

### Решение

Величину  $\varphi$  можно найти из результатов измерения с помощью *закона Малюса*<sup>1)</sup>,

$$N_1 = N \sin^2 \varphi; \quad N_2 = N \cos^2 \varphi, \quad (8.53)$$

где  $N = N_1 + N_2$  — полное число зарегистрированных фотонов. Из формулы (8.53) мы имеем:

$$\operatorname{tg}^2 \varphi = \frac{N_1}{N_2}. \quad (8.54)$$

Поскольку  $N_1, N_2 \gg 1$ , то для пуассоновской статистики неопределенности чисел  $N_1, N_2$  и  $N$  даются просто квадратными корнями из этих чисел. Это означает, что если мы проведем это измерение еще раз при тех же условиях, то новые значения каждого из чисел с вероятностью 0,68 будет отличаться от результатов первого измерения не более, чем на одно стандартное отклонение.

Дифференцируя (8.54), получаем

$$\frac{2 \operatorname{tg} \varphi \delta \varphi}{\cos^2 \varphi} = \frac{\delta N_1 N_2 - N_1 \delta N_2}{N_2^2}. \quad (8.55)$$

<sup>1)</sup> Закон Малюса утверждает, что для идеального линейного поляризатора (весь свет с плоскостью поляризации, параллельной оси поляризатора, пропускается поляризатором, а весь свет, поляризованный в ортогональной плоскости — отражается или поглощается) амплитуда прошедшего электрического поля выражается формулой  $\mathcal{E}_t = \mathcal{E}_0 \cos \varphi$ , где  $\mathcal{E}_0$  — амплитуда падающего поля световой волны, а  $\varphi$  — угол между плоскостью поляризации света и осью поляризатора.

Пользуясь тем фактом, что  $\delta N_1 = \sqrt{N_1}$  и  $\delta N_2 = \sqrt{N_2}$ , а также выражениями (8.53), и складывая квадратурные ошибки <sup>1)</sup>, мы получаем из формулы (8.55)

$$\boxed{\delta\varphi = \frac{1}{2\sqrt{N}}}, \quad (8.56)$$

т. е. дробовой шум поляриметра определяется только полным числом регистрируемых фотонов и не зависит от угла  $\varphi$  <sup>2)</sup>.

Формула (8.56) представляет собой так называемый *стандартный квантовый предел* (СКП) чувствительности поляриметрических измерений. Этот предел может быть, в принципе, преодолен при использовании сжатых состояний света (см. задачи 8.7 и 8.8); однако пока сжатый свет не нашел практических применений в поляриметрии. Можно надеяться, что эта ситуация будет меняться по мере развития техники получения сжатого света и его высокоэффективного детектирования.

### 8.10. Управление поляризацией света с помощью фазовой пластинки

Пусть линейно поляризованный свет проходит через прозрачную фазовую пластинку с *варьируемым сдвигом фаз* между собственными поляризациями, причем ось пластинки составляет угол  $\alpha_0$  с плоскостью поляризации падающего света. Фазовая пластинка с варьируемым запаздыванием (в качестве которой может использоваться, например, ячейки Поккельса или Керра, жидкокристаллическое устройство или фотоупругий модулятор; см., например, [Huard (1997)] или [Yariv и Yeh (1984)])

<sup>1)</sup> Может показаться неочевидным, что дробовые флуктуации в двух каналах являются независимыми. Чтобы понять это, обратим внимание на тот факт, что входной пучок может быть разложен на два когерентных пучка с ортогональными поляризациями, параллельными главным направлениям ПСД ( $\parallel$  и  $\perp$ ). Эти пучки поступают без ослабления в соответствующие выходные каналы ПСД, а квантовые флуктуации в этих двух пучках оказываются независимыми. Для интенсивностей двух пучков мы имеем:

$$\begin{aligned} I_{\parallel} &\propto \mathcal{E}_0^2 \cos^2 \varphi \pm 2\mathcal{E}_0 \cos \varphi \Delta\mathcal{E}, \\ I_{\perp} &\propto \mathcal{E}_0^2 \sin^2 \varphi \pm 2\mathcal{E}_0 \sin \varphi \Delta\mathcal{E}. \end{aligned}$$

В таком представлении мы получаем согласованные выражения для интенсивности и квантовых флуктуаций комбинированного пучка, если мы примем, что флуктуации являются независимыми и скомбинируем их по квадратурам:

$$I_{\text{tot}} = I_{\perp} + I_{\parallel} = \mathcal{E}_0^2 (\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi) \pm \sqrt{4\mathcal{E}_0^2 \sin^2 \varphi \Delta\mathcal{E} + 4\mathcal{E}_0^2 \cos^2 \varphi \Delta\mathcal{E}} = \mathcal{E}_0^2 \pm 2\mathcal{E}_0 \Delta\mathcal{E}.$$

<sup>2)</sup> Это, формально справедливое, заключение имеет ограниченный практический смысл. Причин тому две. Во-первых, в реальных поляризационных схемах вблизи положения скрещенности закон Малюса (8.53) перестает работать в силу неидеальности поляризаторов (см. также задачу 8.10) и невозможности пренебречь шумами схемы регистрации при малых фототоках. Во-вторых, в поляриметрических схемах с лазерными источниками флуктуации интенсивности фототока зачастую определяются избыточными световыми шумами с линейной (а не корневой) зависимостью от интенсивности. В этих случаях сделанный вывод теряет свою силу, и от грамотного выбора угла может существенным образом зависеть чувствительность поляриметрических измерений (подробнее см. Александров Е. Б., Запасский В. С. Лазерная магнитная спектроскопия. М: Наука, 1986. 279 с.). — *Примеч. ред.*

меняет на  $\Phi$  разность фаз между составляющими электрического поля световой волны, направленными параллельно и перпендикулярно оси пластинки.

Рассмотреть поляризацию света на выходе из пластинки как функцию  $\Phi$  при изменении  $\Phi$  от  $-\pi$  до  $\pi$ . Заметим, что когда  $\Phi = \pm\pi$  или  $\Phi = \pm\pi/2$ , фазовая пластинка превращается, соответственно, в *полуволновую пластинку* или *четвертьволновую пластинку*. Рассмотреть три случая (для которых формулы становятся вполне компактными):

(а)  $\alpha_0 \ll 1$ ,

(б)  $\alpha_0 = \pi/4$  и

(в) произвольный  $\alpha_0$ , но  $\Phi \ll 1$ .

### Подсказка

Полезно воспользоваться *методом расчета Джонса*, описанным в Приложении D.

### Решение

(а) Будем считать, что проекции вектора электрического поля падающего света на оси фазовой пластинки пропорциональны  $\cos \alpha_0 \cos \omega t \approx \cos \omega t$  и  $\sin \alpha_0 \cos \omega t \approx \approx \alpha_0 \cos \omega t$  (поскольку  $\alpha_0 \ll 1$ ), где  $\omega t$  — фаза входного излучения. Две компоненты поля часто записываются в форме *вектора Джонса* (Приложение D) без множителя  $\omega t$ :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha_0 \end{pmatrix}. \quad (8.57)$$

На выходе фазовой пластинки компоненты электрического поля описываются выражением

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \alpha_0 e^{i\Phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha_0 \cos \Phi + i\alpha_0 \sin \Phi \end{pmatrix}. \quad (8.58)$$

При малых  $\alpha_0$  это соответствует эллипсу поляризации с эллиптичностью (равной арктангенсу отношения полуосей эллипса поляризации)  $\epsilon \approx \alpha_0 \sin \Phi$ , повернутому на угол  $\alpha - \alpha_0 \approx \alpha_0(\cos \Phi - 1)$  по отношению к начальному азимуту плоскости поляризации (рис. 8.9).

Матрица Джонса  $\mathbf{M}$ , соответствующая фазовой пластинке с варьируемым запаздыванием (с осями вдоль  $x$  и  $y$ ), очевидно, имеет вид

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\Phi} \end{pmatrix}. \quad (8.59)$$

(б) При  $\alpha_0 = \pi/4$  для вектора Джонса  $\mathbf{V}'$ , описывающего поляризацию на выходе из пластинки, имеем

$$\mathbf{V}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\Phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\Phi} \end{pmatrix}. \quad (8.60)$$

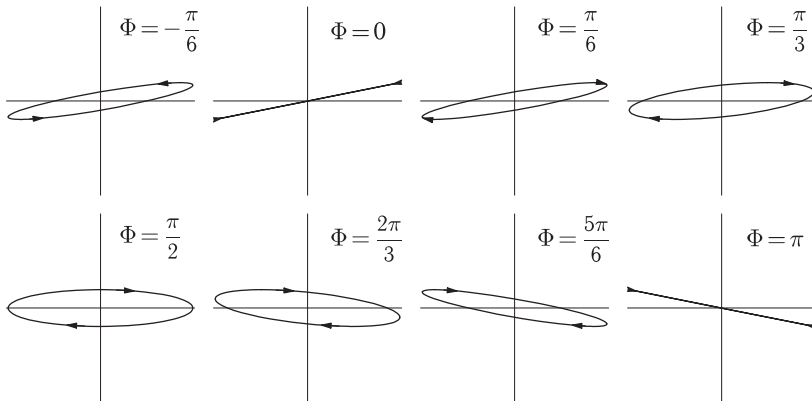


Рис. 8.9. Иллюстрация изменения поляризации света, проходящего через фазовую пластинку, сдвигающую фазу вертикальной компоненты электрического поля световой волны на  $\Phi$  по отношению к фазе горизонтальной компоненты. Плоскость поляризации падающего света отклонена от горизонтальной оси на угол  $\alpha = \pi/16$ . Эллипсы поляризации изображают движение конца вектора электрического поля при изменении фазы поля в интервале  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Заметим, что тогда как эллиптичность  $\epsilon$  является нечетной функцией  $\Phi$ , поляризационный угол  $\alpha$  является четной функцией  $\Phi$

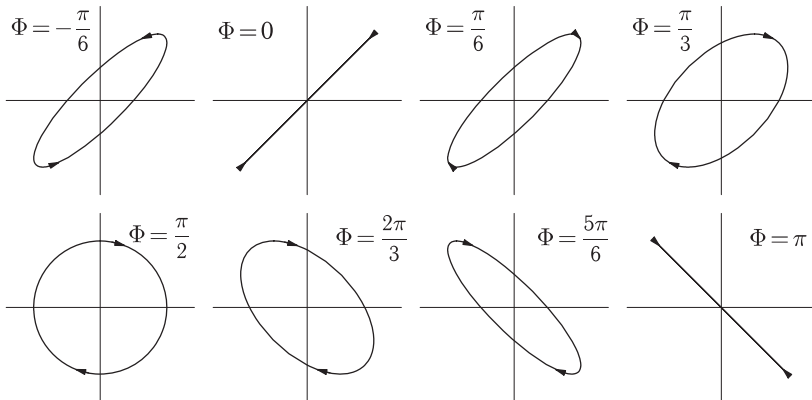


Рис. 8.10. То же, что на рис. 8.9, но теперь плоскость поляризации падающего света отклонена от горизонтали на угол  $\alpha_0 = \pi/4$ . В этом случае главная ось эллипса поляризации не поворачивается. При  $\Phi = \pi/2$  (четвертьволновое запаздывание) выходящий из пластинки пучок циркулярно поляризован. При  $\pi/2 < \Phi < 3\pi/2$  большая полуось эллипса поляризации перпендикулярна направлению входной поляризации. При  $\Phi = \pi$  действие фазовой пластинки сводится к эффективному повороту входной поляризации на угол  $\pi/2$ , несмотря на тот факт, что главные оси эллипса остаются неподвижными

Этот случай иллюстрируется рис. 8.10. Теперь одна из главных осей эллипса поляризации всегда совпадает с начальным направлением поляризации, а эллиптичность определяется запаздыванием:  $\epsilon = \Phi/2$ <sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Обращаем внимание на то, что эллиптичность циркулярно поляризованного света равна  $\pm\pi/4$ .



(в) При малых  $\Phi$  имеем

$$\mathbf{M} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + i\Phi \end{pmatrix}, \quad (8.61)$$

и, следовательно, вектор выходной поляризации имеет вид

$$\mathbf{V}' \approx \begin{pmatrix} \cos \alpha_0 \\ \sin \alpha_0 (1 + i\Phi) \end{pmatrix}. \quad (8.62)$$

Что это за поляризация? Это легко определить, если повернуть систему отсчета на  $-\alpha_0$  (направив ось  $x$  вдоль плоскости поляризации входного света). Тогда мы получаем

$$\mathcal{R}(-\alpha_0) \cdot \mathbf{V}' = \begin{pmatrix} \cos \alpha_0 & \sin \alpha_0 \\ -\sin \alpha_0 & \cos \alpha_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \alpha_0 \\ \sin \alpha_0 (1 + i\Phi) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ i\Phi \sin \alpha_0 \cos \alpha_0 \end{pmatrix}, \quad (8.63)$$

что, очевидно, представляет собой эллиптически поляризованный свет с большой осью эллипса, направленной вдоль поляризации входного света. Следовательно, такая фазовая пластинка вносит только эллиптичность и не вызывает вращения.

Фазовые пластинки с варьруемым запаздыванием крайне полезны в высокочувствительной *модуляционной поляриметрии*. Допустим, мы имеем образец, который вносит малое вращение  $\alpha_s$  и малую эллиптичность  $\epsilon_s$  в падающий на него линейно поляризованный свет, и эти величины ( $\alpha_s$  и  $\epsilon_s$ ) мы хотим измерить. Простейший способ сделать это состоит в том, чтобы поместить образец между скрещенными поляризатором и анализатором и измерить интенсивность прошедшего света, которая должна быть пропорциональной  $\alpha_s^2 + \epsilon_s^2$ . Этот способ, однако, имеет серьезные недостатки. Кроме того, что он не позволяет независимо измерить  $\alpha_s$  и  $\epsilon_s$  или определить их знаки, он также непригоден для измерений эллиптичностей и вращений в тех случаях, когда их воздействие на интенсивность прошедшего пучка меньше, чем *параметр экстинкции* поляризатора и анализатора (т. е. отношения интенсивностей прошедшего и падающего пучков для номинально скрещенных поляризатора и анализатора), который для лучших кристаллических поляризаторов составляет  $10^{-6}$ – $10^{-7}$  [Birich и др. (1994)] <sup>1)</sup>.

Допустим, что мы помещаем фазовую пластинку с варьруемым запаздыванием, как уже обсуждалось в этой задаче, последовательно с образцом между поляризатором и анализатором. Выберем  $\alpha_0$ , например, таким образом, что, хотя  $\alpha_0 \ll 1$ , эта величина одновременно много больше  $\alpha_s$ ,  $\epsilon_s$  и квадратного корня из параметра экстинкции. В этом случае (используя результаты п. (а)) для интенсивности света  $I$ , прошедшего через анализатор, мы имеем:

$$I \approx I_0 \{ (\alpha + \alpha_s)^2 + (\epsilon + \epsilon_s)^2 \} \approx \quad (8.64)$$

$$\approx I_0 \{ \alpha_0^2 \cos^2 \Phi + 2\alpha_0(\alpha_s \cos \Phi + \epsilon_s \sin \Phi) + \alpha_0^2 \sin^2 \Phi \} = \quad (8.65)$$

$$= I_0 \{ \alpha_0^2 + 2\alpha_0(\alpha_s \cos \Phi + \epsilon_s \sin \Phi) \}, \quad (8.66)$$

<sup>1)</sup> Точнее, если интенсивность сигнала намного меньше, чем интенсивность света, проходящего через анализатор вследствие конечной экстинкции поляризующих элементов, то именно этот свет будет служить основным источником шума.

где  $I_0$  — интенсивность света на входе. Если  $\Phi$  модулируется на частоте  $\Omega$ , и интенсивность на выходе анализируется с помощью *синхронного детектора*, выбирающего компоненту сигнала на частоте заданной гармоники ( $\Omega$ ,  $2\Omega$  и т. д.), величина  $\epsilon_s$  может быть извлечена из сигнала нечетной гармоники (1, 3 и т. д.), а величина  $\alpha_s$  — из сигнала четной гармоники. Более того, ограничения, связанные с конечностью параметра экстинкции, в такой геометрии могут быть в значительной степени преодолены.

### 8.11. Наложение импульсов при счете фотонов

Система счета фотонов имеет  $N$  элементов разрешения на единицу времени (например, 256 элементов на 1 мкс). Допустим, что  $n$  фотонов при  $n \ll N$  детектируется за одну микросекунду и что времена поступления фотонов некоррелированы. Какова вероятность того, что в течение одной микросекунды не больше одного фотона будет зарегистрировано каждым элементом разрешения (т. е. что отсутствует *наложение импульсов*)<sup>1)</sup>?

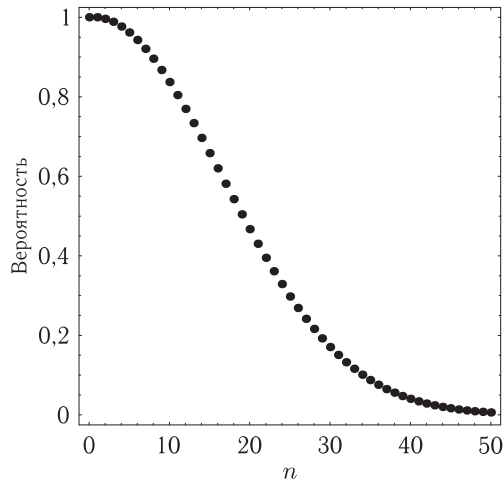


Рис. 8.11. Вероятность того, что не более одного фотона попадает в каждый из  $N = 256$  элементов разрешения как функция полного числа фотонов  $n$ , поступающих за одну микросекунду

#### Решение

Существует  $N^n$  различных способов размещения последовательности  $n$  фотонов по  $N$  ячейкам. Если, однако, мы не допускаем возможности вторичного попадания фотона в один и тот же элемент, то существует только  $N!/(N-n)!$  доступных сочетаний. Таким образом, вероятность отсутствия перекрытия в течение заданной микросекунды описывается выражением

$$P = \frac{N!}{(N-n)! N^n}. \quad (8.67)$$

<sup>1)</sup> Эту задачу предложил V. E. Matizen.

Эта вероятность падает очень быстро, что иллюстрируется рис. 8.11 для  $N = 256$ . Уже при  $N = 20$  существует  $\approx 50$ -процентная вероятность попадания двух фотонов в один и тот же элемент.

## 8.12. Фотоны в моде лазерного пучка

Рассмотрим объемный накопитель энергии, представляющий собой оптический резонатор с добротностью  $Q$  (рис. 8.12). Пусть резонатор состоит из двух идентичных, лишенных потерь, зеркал (с конечным пропусканием), так что коэффициент пропускания резонансного света через резонатор равен единице. Пусть резонатор освещается узкополосным (спектральная ширина линии излучения уже ширины линии резонатора) резонансным лазерным излучением мощностью  $P$ .

Вычислить число фотонов  $n$  в резонаторе. Сколько фотонов на моду содержится в выходном пучке?

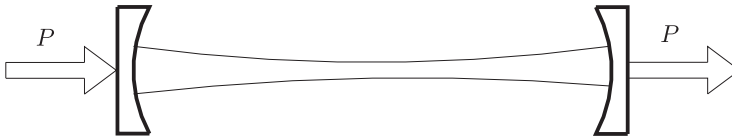


Рис. 8.12. Схема накопительного резонатора

### Решение

Поведение энергии  $E$  внутри резонатора

$$E = n\hbar\omega, \quad (8.68)$$

где  $\omega$  — резонансная частота резонатора, управляется кинетическим уравнением

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\gamma E + P, \quad (8.69)$$

где

$$\gamma = \frac{\omega}{Q} \quad (8.70)$$

— ширина линии резонатора. Таким образом, в равновесии число фотонов в резонаторе дается формулой

$$n = \frac{P}{\hbar\omega\gamma} = \frac{QP}{\hbar\omega^2}. \quad (8.71)$$

Чтобы ответить на вопрос о том, сколько фотонов на моду находится в выходном пучке, мы должны определить, что мы, в этом случае, вкладываем в понятие моды. Определение моды зависит от экспериментальной ситуации, т.е. моды электромагнитного поля в одном резонаторе это не то же самое, что моды в другом резонаторе. Для свободной бегущей электромагнитной волны длина модового объема определяется *длиной когерентности*  $l_c = c/\gamma_l$ , где  $\gamma_l$  — спектральная ширина выходного излучения, которая, в рассматриваемом случае, определяется спектральной шириной входного излучения. (Эта ширина может быть настолько малой, насколько

это допускает ограничение Шавлова–Таунса, см. задачу 5.2). Поток фотонов через поперечное сечение моды равен  $P/\hbar\omega$ , объем моды проходит через это сечение за время  $l_c/\gamma_l$ . Следовательно, число фотонов в моде лазерного пучка равно <sup>1)</sup>

$$n = \frac{P}{\hbar\omega\gamma_l}. \quad (8.72)$$

### 8.13. Настройка лазера на красителе

В течение многих лет перестраиваемые лазеры на красителе <sup>2)</sup> служили рабочими лошадками лазерной спектроскопии. Активными средами лазеров на красителях служат растворы органических молекул с широкими сплошными спектрами флуоресценции при возбуждении видимой или УФ накачкой <sup>3)</sup>. Молекулы красителя, возбуждаемые излучением накачки в высоколежащие электронные состояния, испытывают быстрые (времена релаксации обычно лежат в диапазоне  $10^{-11}$ – $10^{-12}$  с) индуцированные столкновениями переходы на нижайший колебательный уровень возбужденного состояния. Таким образом, при достаточно высокой мощности накачки, населенность нижайшего колебательного уровня возбужденного состояния может стать больше, чем населенность высоковозбужденных колебательных уровней основного электронного состояния молекулы красителя. Возникающая таким образом инверсия населенности приводит к лазерной генерации.

В этой задаче мы обсуждаем различные методы перестройки частоты импульсных и непрерывных лазеров на красителе.

**(а)** В импульсном лазере на красителе, схематично изображенном на рис. 8.13, верхний отражатель резонатора представляет собой дифракционную решетку в конфигурации Литтрова (когда отражение первого порядка от решетки направляется назад в резонатор, так что решетка служит спектрально селективным отражателем, подробнее см. в [Demtröder (1996)]). Грубая настройка частоты выходного излучения осуществляется путем изменения наклона дифракционной решетки, а тонкая перестройка осуществляется путем изменения давления воздуха в барокамере в диапазоне от 0 до 3 атм. Определить интервал тонкой перестройки этого лазера для видимого диапазона выходного излучения. Предложить способ увеличения этого диапазона.

**(б)** В непрерывном лазере на красителе спектральная узость достигается установкой внутри резонатора селективных элементов: двупреломляющего фильтра Лию, тонкой стеклянной пластинки (тонкий эталон) и низкодобротного интерферометра

<sup>1)</sup> Предполагается, что возбуждается единственная мода резонатора. — *Примеч. ред.*

<sup>2)</sup> Лазерная генерация в органических красителях была независимо открыта рядом авторов [Sorokin и Lankard (1966)] и [Schaeg и др. (1966)], и были разработаны важные методы непрерывной перестройки частоты лазеров на красителях [Soffer и McFarland (1967), Hansch (1972)] и др. Исчерпывающее рассмотрение лазеров на красителях можно найти в [Duarte и Hillman (1990)].

<sup>3)</sup> Эти спектры являются широкими и сплошными вследствие полного перекрытия уширенных столкновениями спектральных линий, соответствующих переходам между различными ро-вибронными компонентами электронных состояний молекул красителя. Столкновительное уширение является результатом взаимодействия молекул красителя с растворителем.

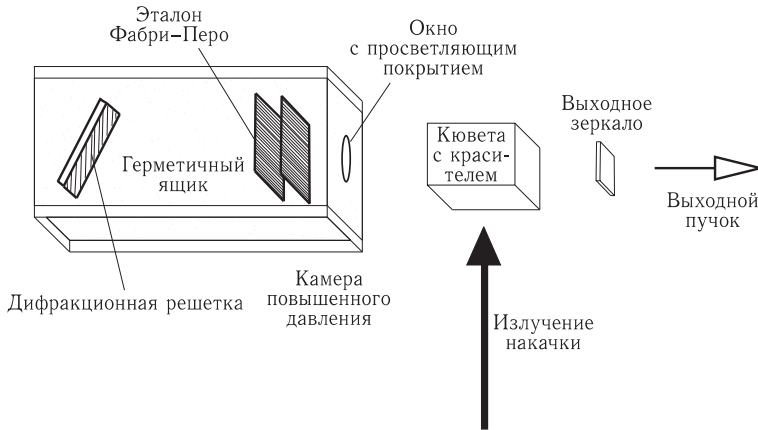


Рис. 8.13. Схема импульсного лазера на красителе

Фабри-Перо (толстый эталон). Когда максимумы пропускания всех этих элементов и резонатора совпадают, лазер излучает свет на одной продольной моде. Для плавного изменения частоты лазерного излучения необходимо одновременно перестраивать максимумы пропускания резонатора и селективных элементов. Чтобы достичь диапазона плавной перестройки порядка нескольких ГГц, обычно достаточно перестраивать только резонатор и тонкий эталон. Это можно реализовать путем установки одного из зеркал резонатора и одного из зеркал толстого эталона на пьезоподвижки, которые могут перемещать зеркала под действием приложенного напряжения, меняя, таким образом, длину резонатора и толщину толстого эталона.

Какова длина лазерного резонатора и воздушного промежутка между зеркалами толстого эталона, если их области свободной дисперсии (т. е. расстояние между их продольными модами) равны 400 МГц и 10 ГГц, соответственно?

Чему равно смещение пьезоуправляемых элементов резонатора и толстого эталона, необходимое для перестройки лазера на 5 ГГц?

### Решение

(а) Заметим, прежде всего, что при помещении и решетки и эталона Фабри-Перо в одну барокамеру, мы автоматически получаем одновременную и согласованную перестройку обоих элементов. Условия конструктивной интерференции и для решетки, и для эталона можно записать в виде

$$\frac{\kappa\lambda}{2} = L, \quad (8.73)$$

где  $\kappa$  — целое число, а  $L$  — соответствующая длина. Для плавной перестройки (т. е. с отсутствием «скачков» частоты) величины  $\kappa$ ,  $\lambda$  и  $L$  должны быть постоянными, и изменение выходной частоты может быть определено из соотношения

$$\nu + \delta\nu = \frac{c}{(n + \delta n)\lambda} \approx \frac{c}{n\lambda} \left(1 - \frac{\delta n}{n}\right), \quad (8.74)$$

откуда получаем

$$\boxed{\delta\nu \approx -\nu \frac{\delta n}{n}} \quad (8.75)$$

Здесь  $n$  — показатель преломления воздуха в барокамере ( $n - 1 \approx 2,8 \cdot 10^{-4}$  при нормальных условиях для  $\lambda = 600$  нм, и  $n - 1$  приблизительно пропорционально плотности воздуха). При изменении давления на 3 атм на частоте  $\nu = 5 \cdot 10^{14}$  Гц диапазон перестройки частоты составляет  $\approx 400$  ГГц, что соответствует диапазону перестройки длины волны  $\approx 0,5$  нм выходного излучения. Диапазон перестройки может быть увеличен за счет использования газа с более высоким показателем преломления, например, двуокись углерода ( $n - 1 = 4,1 \cdot 10^{-4}$ ), изобутан ( $n - 1 = 1,3 \cdot 10^{-3}$ ) и т. д.

**Внимание:** известны случаи, когда люди наносили существенный ущерб своим лазерам, пытаясь использовать газы, химически взаимодействующие с оптическими покрытиями.

(б) Для интервала свободной дисперсии мы имеем (предполагая, что речь идет о двухзеркальной невырожденной (т. е. неконфокальной) конфигурации):

$$\Delta\nu = \frac{c}{2L}, \quad (8.76)$$

так что

$$L_{\text{резонатора}} = 37,5 \text{ см} \quad (8.77)$$

и

$$L_{\text{эталона}} = 1,5 \text{ см}. \quad (8.78)$$

В резонансе на длине резонатора и эталона должно укладываться целое число полуволин:

$$L = \frac{n\lambda}{2} = \frac{nc}{2\nu}, \quad (8.79)$$

где  $n$  — целое число. При плавной перестройке частоты не происходит «модовых перескоков», и  $n$  не меняется. Дифференцируя обе части выражения (8.79), мы получаем:

$$\frac{\delta L}{L} = -\frac{\delta\nu}{\nu}. \quad (8.80)$$

Для  $\delta\nu = 5$  ГГц и  $\nu = 5 \cdot 10^{14}$  Гц ( $\lambda = 600$  нм):

$$\delta L_{\text{резонатора}} = -3,75 \text{ мкм} \quad (8.81)$$

и

$$\delta L_{\text{эталона}} = -0,15 \text{ мкм}. \quad (8.82)$$

## 8.14. Волны материи и гироскоп Саньяка

Рассмотрим гироскопы, основанные на эффекте Саньяка (сдвиг интерференционных полос, возникающий при вращении интерферометра, см. рис. 8.14, *a-в*). Лазерные гироскопы, основанные на этом принципе, широко используются в навигации (например, на самолетах). Недавно были продемонстрированы новые перспективные гироскопы, использующие волны материи [Gustavson и др. (1997), (2000)].

**(а)** Показать, что фазовый сдвиг, связанный с вращением интерферометра с угловой скоростью  $\vec{\Omega}$ , равен

$$\Delta\phi = N \frac{4\pi\vec{\Omega} \cdot \vec{A}}{\lambda v}, \quad (8.83)$$

где  $\vec{A}$  — вектор площади (вектор, перпендикулярный плоскости интерферометра, с длиной, равной охватываемой им площади),  $\lambda$  — длина волны интерферирующих фотонов или атомов,  $v$  — скорость их распространения, а  $N$  — число циклов движения интерферирующих частиц по интерферометру ( $N = 2$  для интерферометра, изображенного на рис. 8.14, а, и  $N = 1$  для интерферометра, изображенного на рис. 8.14, б).

**(б)** Показать, что чувствительность прибора, использующего волны материи (с частицами массы  $M$ ), выше чувствительности аналогичных фотонных устройств (с той же площадью и тем же потоком частиц) в число раз

$$\frac{Mc^2}{\hbar\omega} \sim 10^{11}. \quad (8.84)$$

Почему лазерные гироскопы, несмотря на величину этого множителя, все же являются полезными?

**(в)** Оценить чувствительность в (рад/с)/ $\sqrt{t}$ , где  $t$  — время измерения (с), для прибора, использующего атомы цезия при полном потоке частиц  $10^{11}$  атом/с и площадь  $A = 20 \text{ мм}^2$ .

### Решение

**(а)** Рассмотрим сначала случай фотонов. Эффект Саньяка можно считать результатом доплеровского сдвига при отражении света от движущегося зеркала (см. задачу 8.1). Свет с волновым вектором  $\vec{k}$ , отражающийся от зеркала, которое медленно движется со скоростью  $\vec{v}_m$ , испытывает изменение величины волнового вектора, которое в первом порядке имеет вид

$$\Delta\vec{k} = \frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{v}_m}{v}, \quad (8.85)$$

где в данном случае  $v = c$  — скорость света. В случае нерелятивистского атома, движущегося со скоростью  $v \ll v_m$ , элементарное рассмотрение упругого рассеяния от движущегося зеркала приводит к тому же результату (формула (8.85)).

Используя тот факт, что скорость зеркала дается формулой  $\vec{v}_m = \vec{\Omega} \times \vec{r}$ , где  $\vec{r}$  — радиус-вектор зеркала по отношению к оси вращения интерферометра, получаем из выражения (8.85):

$$\Delta\vec{k} = \frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{\Omega} \times \vec{r}}{v} = -\frac{\vec{\Omega} \cdot \Delta\vec{k} \times \vec{r}}{v}. \quad (8.86)$$

Заметим, что при радиальном направлении вектора  $\Delta\vec{k}$  никакого доплеровского сдвига не наблюдается. Простая конфигурация интерферометра Саньяка — круговая — показана на рис. 8.14, в. Здесь свет направляется по кругу, например, с помощью

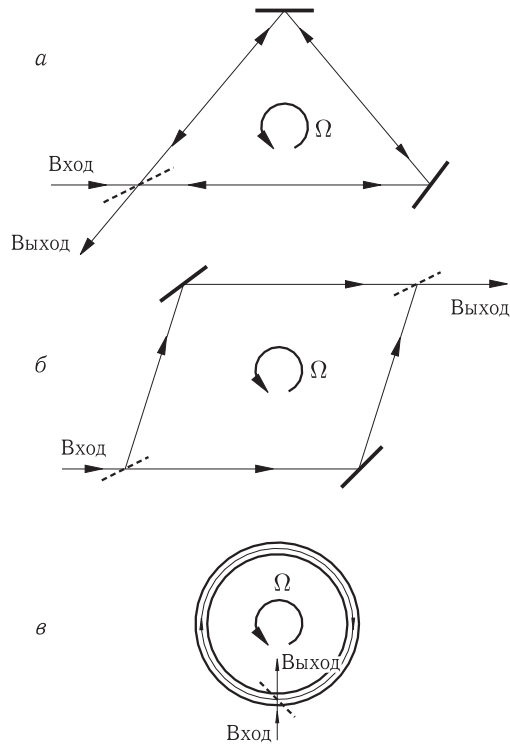


Рис. 8.14. Схематичное изображение различных конфигураций интерферометра Саньяка

оптического волокна. В этой установке величина волнового вектора сдвигается за счет эффекта Доплера только на входе и на выходе. Изменение величины волнового вектора для части волны, отраженной зеркалом на входе, составляет

$$\Delta k = -\frac{\vec{\Omega}}{v} \cdot (\vec{k}' - \vec{k}) \times \vec{r} = -\frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{k}' \times \vec{r}}{v} = -\frac{k' \Omega r}{v} \approx -\frac{k \Omega r}{v}, \quad (8.87)$$

где  $\vec{k}$  — волновой вектор падающего света (который параллелен вектору  $\vec{r}$  и имеет величину  $k$ ), а  $\vec{k}'$  — волновой вектор отраженного света (который ортогонален вектору  $\vec{r}$  и имеет величину  $k' \approx k + \Delta k$ ); мы пренебрегаем членами выше второго порядка по  $(r\Omega/v)$ . Согласно выражению (8.87), по мере того как отраженный световой пучок циркулирует по петле, он аккумулирует фазовый сдвиг величины

$$\Delta\phi = \int_0^{2\pi} \Delta k r d\theta = 2\pi r \Delta k = 2 \frac{k A \Omega}{v} = \frac{4\pi \vec{\Omega} \cdot \vec{A}}{\lambda v}, \quad (8.88)$$

обусловленный вращением устройства с частотой  $\vec{\Omega}$ , где  $\theta$  — угол между  $\vec{r}$  и  $-\vec{k}$ .

Траектория света в интерферометре более сложной формы может рассматриваться как состоящая из последовательности бесконечно малых круговых дуг и радиальных участков. При произвольной траектории света суммарный фазовый сдвиг, приобре-



тенный светом, имеет вид

$$\Delta\phi = \int_0^{2\pi} \Delta k(r) r d\theta, \quad (8.89)$$

где теперь  $r$  является функцией  $\theta$  и  $\Delta k(r) = k\Omega r/v$ , как и раньше, но теперь вместо того чтобы возникать в результате начального отражения, этот сдвиг возникает в результате последовательности отражений от зеркал по световой траектории. Таким образом, мы имеем

$$\Delta\phi = \frac{k\Omega}{v} \int_0^{2\pi} r(\theta)^2 d\theta = 2 \frac{kA\Omega}{v}, \quad (8.90)$$

и суммарный фазовый сдвиг на один полный проход по-прежнему дается формулой (8.88)

Заметим, что выражение (8.90) может быть также выведено совершенно из иных соображений, связанных с фейнмановскими интегралами по траекториям, подробно описанными в учебной статье [Storey и Cohen-Tannoudji (1994)].

**(б)** Из выражения (8.88) видно, что фазовый сдвиг обратно пропорционален  $\lambda v$ . Длина волны де Бройля  $\lambda_{dB}$  равна

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{Mv}, \quad (8.91)$$

так что

$$\frac{\Delta\phi_{\text{atom}}}{\Delta\phi_{\text{photon}}} = \frac{\lambda_{\text{photon}} Mc}{2\pi\hbar} = \frac{Mc^2}{\hbar\omega}. \quad (8.92)$$

Для фотонов видимого диапазона частот и для атомов цезия это отношение  $\approx 7 \cdot 10^{10}$ .

Лазерные гироскопы остаются вполне конкурентоспособными<sup>1)</sup>, поскольку они выигрывают за счет высоких доступных потоков коллимированных фотонов (высокий поток частиц обеспечивает большое отношение сигнал/шум); в этом случае легче делать интерферометры с большой площадью и можно заставить фотоны проходить по контуру интерферометра много раз (лазерный гироскопы, использующие оптические волокна, имеют  $N \sim 10^6$ ).

**(в)** Если  $n$  частиц регистрируется в идеальном интерферометре, неопределенность фазы составляет  $\sim n^{-1/2}$ <sup>2)</sup>. Таким образом, из выражения (8.88) мы имеем

$$\delta\Omega = \frac{\lambda v}{4\pi A\sqrt{n}} = \frac{\hbar}{2MA\sqrt{n}} \approx 5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{рад/с}}{\sqrt{t}} \quad (8.93)$$

<sup>1)</sup> Это высказывание отражает, скорее, оптимизм авторов в отношении перспектив развития гироскопии, чем ее современное состояние: в то время как лазерные гироскопы в массовом порядке используются в авиации (будучи много дешевле механических гироскопов), атомные гироскопы до сих пор не вышли за рамки единичных лабораторных демонстраций. — *Примеч. ред.*

<sup>2)</sup> Мы считаем здесь, что волновая функция частиц вторичного квантования описывает когерентное состояние, так что флуктуации определяются дробовым шумом, см. задачи 8.7 и 8.9.

(где  $t$  — время измерения в секундах) для атомов цезия, с потоком  $10^{11}$  атом/с при площади  $A = 20 \text{ мм}^2$ . Заметим, что атомная скорость из выражения (8.93) исключается.

### 8.15. Фемтосекундные лазерные импульсы и частотные гребенки

За последние несколько лет, благодаря открытию метода *частотных гребенок*, в области метрологии лазерных частот были достигнуты революционные успехи.

Гребенка частот генерируется *сверхскоростной лазерной системой*, создающей периодический цуг коротких световых импульсов (с типичной длительностью 10–15 фс;  $1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$ ). Спектр частотной гребенки может простирается более чем на *октаву*, т.е. частота на высокочастотном краю спектра может более чем вдвое превышать частоту на его низкочастотном краю. Спектр гребенки не является непрерывным, а состоит из узких эквидистантных пиков. Прецизионно контролируя положения этих пиков, мы получаем «частотную линейку», с помощью которой можно провести точные измерения любой частоты в пределах спектральной ширины гребенки.

В этой задаче мы изучаем базовые идеи, лежащие в основе техники гребенок частоты. В настоящее время существуют и общедоступные публикации, такие, как [Udem и др. (2002)] и [Hall и др. (2000)], и более специализированные обзорные статьи, как, например, [Cundiff и др. (2001)], которые достаточно полно освещают эту увлекательную область исследований.

**(а)** Допустим, что лазер генерирует цуг импульсов, такой, что интенсивность света в любой пространственной точке лазерного пучка (например, на выходном зеркале) является точно периодической во времени.

Показать, что спектр излучения представляет собой последовательность резких пиков, частоты которых даются формулой

$$f_n = n f_r + f_0. \quad (8.94)$$

Здесь  $f_r$  — частота следования импульсов (обычно,  $10^8 \leq f_r \leq 10^9 \text{ Гц}$ ),  $n$  — целое число (обычно,  $n \sim 10^6$ ) и  $f_0$  — начальная частота, которая, при правильном выборе  $n$ , может быть ограничена интервалом  $0 \leq f_0 < f_r$ .

Выражение (8.94) показывает, что для того, чтобы контролировать абсолютные частоты компонент гребенки, нужно независимо контролировать частоты  $f_r$  и  $f_0$ . Как это делается — мы рассмотрим в следующем пункте этой задачи.

**(б)** Схематичное изображение одной из возможных конфигураций лазера, применяемого для получения гребенки частоты, представлено на рис. 8.15. Активной средой здесь служит кристалл сапфира, активированный титаном, оптически накачиваемый непрерывным лазером (обычно, с длиной волны  $\lambda = 514$  или  $532 \text{ нм}$ ). Область усиления кристалла Ti:сапфир занимает широкий спектральный интервал — приблизительно от 700 до 1000 нм. Четырехзеркальный резонатор стоячей волны имеет форму «бабочки» и содержит важный дополнительный элемент — пару призм, роль которых мы кратко обсудим.

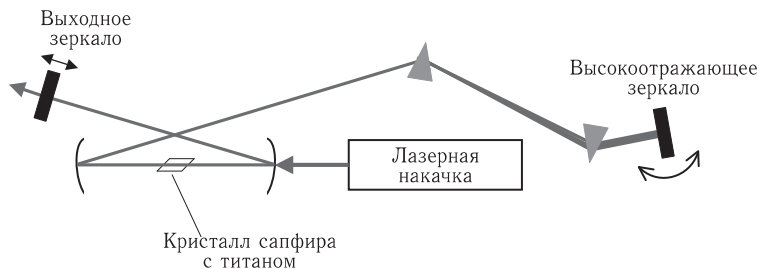


Рис. 8.15. Схема сверхскоростного Ti:сапфирового лазера. Самосинхронизация мод происходит вследствие эффекта керровской фокусировки, благодаря которому потери резонатора оказываются минимальными при максимальной интенсивности света, т.е. для импульсов минимальной длительности. Перемещение и наклон резонаторных зеркал, а также изменение мощности накачки используются для управления частотой компонент гребенки

Из приведенной на рис. 8.15 схемы совсем не очевидно, почему этот лазер является импульсным, а не непрерывным. Фокус состоит в использовании эффекта керровской фокусировки для синхронизации мод. Метод керровской синхронизации мод (КСМ) был предложен в начале 90х годов. Идея этого метода состоит в том, что показатель преломления кристалла Ti:сапфир, как и большинства других материалов, зависит от интенсивности света (это — разновидность эффекта Керра, см. задачу 4.2):

$$n = n_0 + n_2 I, \quad (8.95)$$

где  $n_0$  — не зависящий от интенсивности (линейный) показатель преломления, а  $n_2 I$  — нелинейная часть. Поскольку величина  $n_2$  обычно положительная, свет «видит» более высокий показатель преломления при более высокой интенсивности. В частности, для лазерного пучка с гауссовым профилем поперечного сечения среда превращается в фокусирующую линзу. Резонатор юстируется таким образом, что при низкой интенсивности (когда эффект керровской линзы пренебрежимо мал) потери резонатора велики, тогда как при достаточно высокой интенсивности (которая реализуется в коротком импульсе) потери резонатора значительно снижаются за счет керровской фокусировки. Таким образом в условиях достаточно мощной накачки лазер будет генерировать цуг импульсов. Периодичность следования импульсов определяется временем полного цикла прохода света (туда и обратно) по резонатору. В спектральной области это соответствует наличию большого числа продольных мод резонатора с жестко определенными фазами осцилляций друг относительно друга. Отсюда термин *синхронизация мод*; см. [Siegman (1986)] в качестве великолепного введения в эту физику. В такой картине частота следования импульсов — это частота биений между соседними модами.

Пара призм вводится в резонатор для компенсации эффекта *дисперсии групповой скорости* (разницы групповых скоростей для различных участков спектра), которая приводит к увеличению длительности лазерного импульса. Призмы сконструированы таким образом, чтобы несколько увеличить длину пути для длинноволновых компонент света и тем самым скомпенсировать дисперсию групповой скорости (ДГС).

Предметом этого пункта задачи является вопрос об управлении обеими частотами  $f_r$  и  $f_0$  из выражения (8.94). Частотой следования импульсов можно управлять путем малых перемещений одного из зеркал резонатора (рис. 8.15).

Чему равно изменение  $f_0$  при перемещении зеркала на  $\Delta L$ ? Показать, что при этом также значительно меняются положения пиков гребенки частоты и что в первом приближении эти спектральные пики перемещаются вместе, так, что расстояние между соседними пиками остается неизменным.

Мы видим, что нужна еще одна степень свободы для того, чтобы скомпенсировать сдвиг частоты, вводимый перемещением зеркала и повлиять на начальную частоту  $f_0$ . Это можно реализовать несколькими способами (см. рис. 8.15), включая вращение высокоотражающего зеркала (меняющее толщину материала призмы, сквозь который проходит свет, и, тем самым, меняющие дисперсию) и изменение мощности накачки (которое меняет дисперсию кристалла Ti:сапфир).

Эти степени свободы позволяют управлять величинами  $f_r$  и  $f_0$  (поскольку они по-разному воздействуют на среднюю фазовую и групповую скорости света), но, к сожалению, не обеспечивают «ортогональный» доступ к этим параметрам. Подробности можно найти в [Hall и др. (2001)].

**(в)** В предыдущем пункте этой задачи мы рассматривали технику получения гребенки частоты и способы управления ее фундаментальными частотами  $f_r$  и  $f_0$ . В данном пункте задачи мы обсуждаем способы измерения этих параметров. Частота  $f_r$  может быть определена непосредственно методом счета числа импульсов за единицу времени. Добраться до частоты  $f_0$  сложнее, если гребенка частоты не простирается более чем на октаву. Здесь мы рассмотрим случай, когда условие превышения октавы выполняется. Сначала мы кратко обсудим способ получения таких широких гребенок частоты.

Выходное излучение титан-сапфирового лазера обычно имеет относительную ширину полосы  $\delta\nu/\nu \approx 0,2$ , т.е. занимает интервал, значительно меньше октавы. К счастью, существуют методы, позволяющие расширить спектр. Идея метода основывается на том факте, что если свет проходит через фазовый модулятор, то его каждая спектральная компонента приобретает *боковые частоты*, отделенные от исходной частоты интервалами, кратными частоте модуляции (см. задачу 8.3). Поскольку сверхкороткий световой импульс, проходящий через среду, вследствие зависимости показателя преломления среды от интенсивности, осуществляет сильную *само модуляцию*, то результатом может быть значительное уширение спектра. Чтобы обеспечить высокую интенсивность света и большую длину взаимодействия (для усиления эффекта само модуляции), можно применить оптическое волокно<sup>1)</sup>. Широкая гребенка генерируется путем пропускания выходного пучка сверхскоростного лазера на Ti:сапфире через такое волокно. Можно также расширить спектр, применяя внутрирезонаторные элементы для создания фазовой само модуляции и применяя специальные зеркала, способные компенсировать введенную ДГС.

А теперь — вопрос. Показать, что, если гребенка частот занимает октаву, то начальную частоту  $f_0$  можно определить, измеряя частоту биений между второй гар-

---

<sup>1)</sup> Здесь ограничивающим фактором может быть ДГС, приводящая к расплыванию импульса и снижению интенсивности. Великолепное решение достигается применением *волоконно-оптических фотонных кристаллов*, обеспечивающих малый объем моды и малую ДГС. Такие волокна обычно включают в себя кварцевую сердцевину, окруженную упорядоченной матрицей воздушных каналов.

моникой одной из компонент (расположенной вблизи низкочастотного края гребенки) и ближайшей к ней компонентой вблизи высокочастотного края гребенки<sup>1)</sup>.

### Решение

**(а)** Если интенсивность света является периодической функцией времени, т.е.  $I(t) = I(t + \tau_r)$ , где  $\tau_r = 1/f_r$  — период, то, поскольку  $I = \mathcal{E}\mathcal{E}^*$ , электрическое поле  $\mathcal{E}$  световой волны тоже должно быть периодическим, однако, *с точностью до фазы*:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}(t + \tau_r)e^{i\varphi} \quad (8.96)$$

или в более общем виде:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}(t + k\tau_r)e^{ik\varphi}, \quad (8.97)$$

где  $k$  — целое число.

Удобно ввести зависящее от времени электрическое поле, связанное с одним импульсом,  $\mathcal{E}_1(t)$ . Это поле быстро осциллирует, вообще говоря, на центральной (*несущей*) частоте.

Поле всей последовательности импульсов может быть записано в виде:

$$\mathcal{E}(t) = \sum_k \mathcal{E}_1(t - k\tau_r)e^{ik\varphi}. \quad (8.98)$$

Теперь мы готовы получить спектр цуга импульсов, пользуясь преобразованием Фурье временной зависимости электрического поля:

$$\mathcal{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k \mathcal{E}_1(t - k\tau_r)e^{ik\varphi}e^{-i\omega t} dt = \quad (8.99)$$

$$= \sum_k e^{ik\varphi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}_1(t')e^{-i\omega t'}e^{-i\omega k\tau_r} dt' = \left( \sum_k e^{ik\varphi - i\omega k\tau_r} \right) \mathcal{E}_1(\omega), \quad (8.100)$$

где для получения второго равенства мы использовали соотношение  $t' = t - k\tau_r$ .

Когда в выражении (8.100) суммируется большое число членов, результат, в общем случае, зануляется в результате усреднения. Однако, если вклады различных импульсов (с различными значениями  $k$ ), будучи синфазными, складываются, в спектре возникает пик. Это происходит, когда

$$\omega\tau_r - \varphi = 2\pi n, \quad (8.101)$$

что можно переписать в виде

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\tau_r} n + \frac{\varphi}{\tau_r}, \quad (8.102)$$

в согласии с (8.94).

<sup>1)</sup> На практике нет нужды выделять одну низкочастотную компоненту. Посылая низкочастотную часть гребенки (выделенную дихроичным зеркалом) на нелинейный кристалл, мы получим не только гармоники удвоенной частоты, но и компоненты суммарных частот (см. задачу 8.4). Каждая из этих компонент будет колебаться с соответствующей ближайшей компонентой из высокочастотной части гребенки с той же частотой биений.

Мы видим, что начальная частота  $f_0 = \varphi/(2\pi\tau_r)$  связана со смещением фазы электрического поля относительно фазы огибающей, определяющей интенсивность света. Она называется *фазой огибающей несущей*.

(б) Перемещение зеркала на малую величину  $\Delta L$  меняет частоту  $\nu_c$  каждой моды резонатора на

$$\delta\nu_c = -\frac{\Delta L}{L} \nu_c, \quad (8.103)$$

где  $L$  — полная эффективная длина резонатора. На самом деле частоты всех мод резонатора внутри гребенки меняются примерно одинаково (относительный разброс частот  $\propto (\nu'_c - \nu_c)/\nu_c \ll 1$ ).

Изменение частоты повторения импульсов может быть определено непосредственно из соотношения

$$\tau_r = \frac{2L}{v_g} \approx 2 \frac{L}{c}. \quad (8.104)$$

Здесь  $v_g$  — средняя групповая скорость, а множитель 2 появляется потому, что импульс проходит длину резонатора дважды за полный обход. Из формулы (8.104) мы видим, что изменение частоты следования импульсов при перемещении зеркала составляет

$$\delta f_r \approx -\frac{\delta\tau_r}{\tau_r^2} \approx -\frac{2f_r^2 \Delta L}{c}. \quad (8.105)$$

В качестве численного примера, для лазера с  $f_r = 100$  МГц и при  $\Delta L = 1$  мкм мы получаем  $\delta f_r \approx -70$  Гц, тогда как из формулы (8.103) для сдвига гребенки как целого получаем  $\approx -240$  МГц.

(в) Допустим, мы выбрали компоненту гребенки с номером  $n$  на низкочастотном краю ее спектра (см. формулу (8.94)). Если мы удвоим частоту этой компоненты, мы получим излучение с частотой  $2nf_r + 2f_0$ . Теперь, если мы заставим интерферировать это излучение с компонентой гребенки с частотой  $2nf_r + f_0$  на ее высокочастотном краю (например, посылая их на один фотоприемник), то полная интенсивность обнаружит биения на разностной частоте  $2nf_r + 2f_0 - 2nf_r - f_0 = f_0$ .

Таким образом, начальная частота  $f_0$  может быть легко измерена, если спектр гребенки частот простирается на одну октаву. Существуют также другие методы измерений  $f_0$  и фазы огибающей несущей, основанные на интерференции задержанного импульса с последующим импульсом цуга [Johnes и др. (2000)].

## 8.16. Флуктуации магнитного поля, связанные со случайными тепловыми токами

Оценить среднеквадратичную величину магнитной индукции на расстоянии  $a$  от большого (с поперечными размерами  $\gg a$ ) тонкого (с толщиной  $\delta \ll a$ ) листа металла с проводимостью  $\sigma$ . Считать, что лист находится при конечной температуре  $T$ .

Сделать численные оценки для алюминия при комнатной температуре для  $a = 10$  см и  $\delta = 0,1$  см (удельное сопротивление алюминия  $\rho(\text{Al}) \approx 2,42 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{см}$ ). Какова частотная зависимость флуктуирующего поля? Как изменится результат, если металл обладает высокой магнитной проницаемостью (например, если это — магнитный экран из сплава CO-NETIC с  $\mu \sim 10^5$ )?

Флуктуирующие магнитные поля, создаваемые проводящими средами, анализировались в контексте применения сверхвысокочувствительной магнитометрии к био-

магнетизму [Neronen и др. (1996), Commins и др. (2003)] и к поискам постоянного электрического дипольного момента [Lamogeaux (1999)].

### Подсказка

Согласно теореме Найквиста (см., например, [Kittel и Kroemer (1980)]), шум напряжения на резисторе  $R$  (обычно называемый *шумом Джонсона*) описывается формулой

$$\langle V^2 \rangle = 4Rk_B T \Delta f, \quad (8.106)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана, а  $\Delta f$  — ширина полосы измерительного канала ( $\Delta f = C/\tau$ , где  $\tau$  — время измерения, а  $C$  — числовая константа (обычно  $1 \leq C \leq 2\pi$  и зависит от конкретного вида частотного отклика измерительного устройства)).

### Решение

Мы утверждаем, что величину магнитного шума можно оценить, рассматривая часть листа с поперечными размерами  $\sim a$  в окрестности точки измерения поля. Заметим сначала, что сопротивление, связанное с областью поперечного размера  $\sim b \gg \delta$ , практически не зависит от  $b$  и приблизительно дается выражением  $R \sim \rho/\delta$ , где  $\rho$  — удельное сопротивление металла.

Ток, возникающий в результате действия шумового напряжения Джонсона, описывается выражением

$$\langle I^2 \rangle = \frac{4k_B T \Delta f}{R} \sim \frac{4k_B T \Delta f \delta}{\rho}. \quad (8.107)$$

Поскольку ток распределяется по участку листа металла с типичными размерами  $\sim b$ , он создает магнитное поле, такое, что

$$\langle B^2 \rangle \sim \frac{2\langle I^2 \rangle b^2}{c^2(b^4 + r^4)}. \quad (8.108)$$

Выражение (8.108) сконструировано таким образом, что усредненный квадрат поля  $\langle B^2 \rangle \sim \langle I^2 \rangle / (cb)^2$  в области пространства с размерами  $\sim b$  спадает как четвертая степень расстояния  $r$  при  $r \gg b$ , что соответствует обычной форме выражения для поля элемента тока.

Из этого обсуждения видно, что если мы выбираем  $b \ll a$ , то чтобы вычислить магнитное поле от участка с размерами  $\sim a$ , мы должны просуммировать  $\sim (a/b)^2$  вкладов в  $B^2$ , что приводит к тому же результату, что получается для одной ячейки с размерами  $\sim a$ . Область листа вне этого участка не вносит существенного вклада, поскольку поле от каждого малого участка с размерами  $\sim b$  с данной величиной тока уменьшается как обратный квадрат расстояния, и, следовательно, его вклад в  $\langle B^2 \rangle$  уменьшается как четвертая степень расстояния, тогда как число участков растет только как квадрат расстояния.

Таким образом, мы получаем оценку шума магнитного поля в виде

$$\boxed{\langle B^2 \rangle \sim \frac{4k_B T \Delta f \delta}{c^2 \rho a^2}}. \quad (8.109)$$

Хотя точность сделанной нами оценки лежит в области порядка величины, результат (8.109) правильно описывает общее поведение эффекта и дает численное значение

коэффициента с точностью до множителя 2 (см. работу [Neponen (1996)] и ссылки в ней).

Подставляя значения  $\rho(\text{Al}) = 2,42 \cdot 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см}$ ,  $1 \text{ Ом} = 1/(9 \cdot 10^{11}) \text{ с/см}$ ,  $T = 300 \text{ К}$ , мы получаем из выражения (8.109):

$$\delta B = \sqrt{\langle B^2 \rangle} \sim 5 \cdot 10^{-10} \frac{\Gamma_{\text{с}}}{\sqrt{\Gamma_{\text{ц}}}} \sqrt{\Delta f}. \quad (8.110)$$

Отметим, что, в рамках приближений, которые мы использовали при выводе соотношения (8.109), шум магнитного поля не зависит от частоты (*белый шум*).

В приведенном рассмотрении мы пренебрегли токами в металле, индуцированными меняющимся магнитным полем, и магнитными полями, индуцированными этими токами (статическое приближение). Эти токи, однако, не являются пренебрежимо малыми на высоких частотах.

Пусть мы имеем магнитное поле амплитуды  $B$ , меняющееся с частотой  $2\pi f$  и проникающее в наш участок листа металла с размерами  $\sim a$ . ЭДС, индуцированная меняющимся потоком, имеет вид

$$V_{\text{emf}} \sim \frac{2\pi f B a^2}{c}; \quad (8.111)$$

индуцированный ток определяется выражением

$$I_{\text{ind}} \sim \frac{V_{\text{emf}}}{R} \sim \frac{2\pi f B a^2 \delta}{c\rho}, \quad (8.112)$$

а для магнитного поля, индуцированного этим током, имеем:

$$B' \sim \frac{2\pi f B \delta a}{c^2 \rho}. \quad (8.113)$$

Предельная частота, выше которой индуцированные токи будут существенно снижать флуктуации магнитного поля, можно оценить, полагая  $B' \sim B$ :

$$f^* \sim \frac{c^2 \rho}{2\pi \delta a}. \quad (8.114)$$

Для нашего численного примера  $f^* \sim 4000 \text{ Гц}$ . Заметим, что на предельной частоте (8.114) для немагнитных материалов ( $\mu = 1$ ), глубина скин-слоя, определяемая выражением (см., например, задачу 8.2)

$$\delta_s = \sqrt{\frac{c^2 \rho}{2\pi(2\pi f)\mu}}, \quad (8.115)$$

составляет  $\delta_s \sim \sqrt{a\delta/(2\pi)} \gg \delta$ <sup>1)</sup>.

Возвращаясь к статическому пределу, вопрос, касающийся материалов с высокой магнитной проницаемостью, состоит в том, будет ли магнитное поле, создаваемое внутри проводника, экранироваться самим материалом (как это было предложено в [Lamoreaux (1999)]). Хотя конкретное соотношение между внутренними токами и магнитными полями снаружи от материала зависит от геометрии задачи, мы можем

<sup>1)</sup> Это не согласуется с утверждением, содержащимся в работе [Lamoreaux (1999)].



показать, пользуясь простым примером, что, в общем случае, такие токи не экранируются.

Представим себе линейный ток  $I$ , текущий параллельно поверхности внутри материала с высокой магнитной проницаемостью (который, для простоты, целиком заполняет полупространство); мы хотим найти магнитное поле снаружи от материала. Решение этой задачи хорошо известно (см., например, [Batygin и др. (1978)] или [Jackson (1975)]): магнитное поле снаружи материала эквивалентно магнитному полю тока величиной

$$I' = \frac{2\mu}{\mu + 1} I \approx 2I, \quad (8.116)$$

текущего там же, где ток  $I$  при отсутствии материала с высокой магнитной проницаемостью.

Таким образом, поле тока, в общем случае, не экранируется (в приведенном выше примере оно даже усиливается); однако, присутствие материала с высокой магнитной проницаемостью, несомненно, влияет на особенности распределения поля.

Рассмотренный в этой задаче эффект в действительности имеет важные последствия для работы с бозе-эйнштейновским конденсатом вблизи поверхности микроципа [Hankel и др. (2003)], когда тепловые токи создают магнитные поля, способные деполяризовать конденсат (см. задачу 2.8).

## Глава 9

### РАЗНЫЕ ДРУГИЕ ТЕМЫ

#### 9.1. Прецессирует ли стрелка компаса?

Если парамагнитный атом ориентирован в направлении, не совпадающем с направлением внешнего магнитного поля, то магнитный момент атома прецессирует вокруг направления магнитного поля на ларморовой частоте  $\Omega_L$ . Стрелка магнитного компаса обычно ведет себя совершенно иным образом. Допустим, что магнитная стрелка может свободно вращаться вокруг центральной точки полвеса. Тогда, будучи освобожденной в состоянии покоя под некоторым углом к магнитному полю, стрелка будет совершать колебания относительно своей равновесной ориентации (где магнитный момент стрелки направлен по полю). Объяснить разницу в поведении этих двух систем. Можно ли создать условия, при которых стрелка будет прецессировать вокруг магнитного поля?

#### Решение

Разница в поведении двух систем связана с разными соотношениями магнитных моментов с механическими угловыми моментами (моментами импульса).

Для атома магнитный момент  $\vec{\mu}$  и полный момент импульса  $\vec{F}$  связаны соотношением

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{F}, \quad (9.1)$$

где  $\gamma \sim \mu_0$  — гиромагнитное отношение. Эволюция углового момента происходит под действием момента силы, возникающего в результате взаимодействия магнитного момента с приложенным магнитным полем:

$$\frac{d\vec{F}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \gamma \vec{F} \times \vec{B}, \quad (9.2)$$

где мы положили  $\hbar = 1$ . Решение этого уравнения дает вращение вектора  $\vec{F}$  вокруг  $\vec{B}$  с угловой скоростью

$$\vec{\Omega}_L = -\gamma \vec{B}. \quad (9.3)$$

Обратимся теперь к случаю магнитной стрелки. Если стрелка намагничена вдоль своей оси (намагниченность  $M$ ), то полный магнитный момент равен

$$\vec{\mu}_n = \pi r^2 l M \hat{n}, \quad (9.4)$$

где  $\hat{n}$  — единичный вектор, направленный вдоль оси стрелки, и мы предполагаем, что стрелка имеет простейшую цилиндрическую форму (радиус  $r$  и длина  $l$ ).

Для обычных ферромагнитных материалов (например, железа) полный эффективный угловой момент на один атом по порядку величины равен единице (в единицах  $\hbar$ ), а типичное эффективное гиромагнитное отношение составляет  $\gamma \approx 2\mu_0$  (см., например, [Kittel (1996)]). Таким образом, отношение магнитного момента намагниченного ферромагнитного объекта к его собственному угловому моменту  $L_0$  примерно такое же, как и для свободного атома.

Однако, радикальная разница между свободным атомом и намагниченной стрелкой состоит в том, что прецессия углового момента свободного атома не вызывает механического движения ядра. Для магнитной же стрелки, напротив, поскольку магнитный момент сцеплен с кристаллической решеткой, его движение в магнитном поле неразрывно связано с макроскопическим движением стрелки как целого.

Пусть, например, стрелка вращается с мгновенной угловой скоростью  $\vec{\Omega}$  вокруг оси, перпендикулярной оси стрелки и проходящей через ее центр. Механический угловой момент, связанный с этим вращением, равен

$$\vec{L} = I\vec{\Omega} = \frac{\pi r^2 l^3 \rho}{12} \vec{\Omega}, \quad (9.5)$$

здесь  $I$  — момент инерции, а  $\rho$  — массовая плотность стрелки.

Оценим величину угловой скорости  $|\vec{\Omega}|$ , отвечающей угловому моменту  $|\vec{L}| \sim L_0$  (которую мы обозначим  $\Omega^*$ ). Исходя из того факта, что каждый атом имеет угловой момент  $\approx \hbar$ , мы можем написать

$$L_0 \approx \pi r^2 l \frac{\rho}{m_a} \hbar, \quad (9.6)$$

где  $m_a$  — масса атома, а  $\rho/m_a$  — число атомов на единицу объема. Сравнивая выражения (9.5) и (9.6), получаем:

$$\Omega^* \approx \frac{12\hbar}{m_a l^2} \approx \frac{12 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}}{56 \times (1,7 \cdot 10^{-24} \text{ г}) \times (0,01 \text{ см})^2} \sim 1 \text{ с}^{-1}, \quad (9.7)$$

где мы подставили числовые величины для железной стрелки длиной 0,01 см.

В движении стрелки можно выделить два предельных случая. При  $|\vec{\Omega}| \gg \Omega^*$ , собственным угловым моментом стрелки можно пренебречь, и стрелка ведет себя обычным образом. С другой стороны, когда  $|\vec{\Omega}| \ll \Omega^*$ , собственный угловой момент является доминирующим, и стрелка будет прецессировать (точно так же, как атом) с ларморовой частотой. Из формулы (9.3) следует, что стрелка с указанными размерами будет прецессировать, пока  $B \ll 10^{-7}$  Гс. Такие малые, хорошо контролируемые магнитные поля могут быть созданы в лаборатории при наличии высококачественного магнитного экранирования.

Существует прямая аналогия между этой системой и всем знакомым волчком с закрепленной точкой опоры, вращающимся в гравитационном поле. До тех пор, пока волчок вращается достаточно быстро, он прецессирует вокруг вертикальной оси. Однако, если вращение замедляется, волчок сваливается на бок, и прецессия прекращается.

## 9.2. Поляризатор ультрахолодных нейтронов

Важнейшим шагом в развитии исследований нейтронов стала возможность их содержания в «бутылках» в течение времени, ограниченного только временем их  $\beta$ -распада ( $\tau \approx 900$  с). Такие бутылки, образованные либо веществом, либо магнитным полем, способны удерживать в себе ультрахолодные нейтроны (УХН) — нейтроны, тепловая энергия которых не превосходит высоты потенциального барьера, создаваемого веществом или магнитным полем (подробный обзор техники и приложений УХН содержится в [Golub и др. (1991)]). Такие УХН испытывают полное отражение от стенок при любом угле падения. В экспериментах, выполняемых в настоящее время в Институте Лауэ–Ланжевена в Гренобле, Франция, и в Санкт-Петербургском Институте ядерной физики в Гатчине, Россия, такие УХН извлекаются из низкоэнергетического крыла максвелловского распределения нейтронов, испускаемых относительно холодным ( $T \sim 20$  К) источником. Ультрахолодные нейтроны, даже с большими плотностями, можно также получать методом неупругого рассеяния холодных нейтронов в сверхтекучем  $^4\text{He}$  [Aregon и др. (1978), Golub и др. (1983), Golub и др. (1991), Huffman и др. (2000)].

Рассмотрим УХН с энергией  $\sim 10^{-7}$  эВ, падающие на слой намагниченного материала с магнитным полем внутри материала, равным  $B$  (см. рис. 9.1).

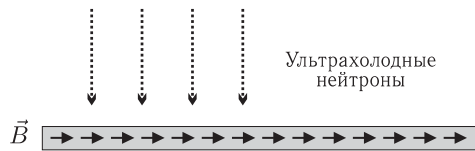


Рис. 9.1. Намагниченный материал как поляризатор для УХН

(а) Пренебрегая краевыми эффектами, найти магнитную индукцию  $B_0$  снаружи от материала.

(б) Вычислить минимальное значение  $B$ , необходимое для того, чтобы эта система работала как спиновый поляризатор для УХН (т.е. чтобы пропускала нейтроны с одной поляризацией и отражала нейтроны с противоположной поляризацией).

### Решение

(а) Пренебрежение краевыми эффектами эквивалентно рассмотрению однородно намагниченного материала как пластинки бесконечной протяженности. Поскольку магнитное поле внутри материала однородно, его можно описать как результат действия «связанных» поверхностных токов, текущих по верхней и нижней поверхности пластины в противоположных направлениях. Такие токи создают однородные магнитные поля, параллельные поверхности и перпендикулярные направлению тока. Внутри материала поля этих токов складываются, образуя поле  $B$ , а снаружи — они вычитаются, так что

$$B_0 = 0.$$

(б) Внутри намагниченного материала энергии электронов со спинами, ориентированными параллельно и антипараллельно магнитному полю, оказываются раз-

личными из-за взаимодействия их магнитных дипольных моментов  $\vec{\mu}_n$  с магнитным полем  $\vec{B}$ . Для полной энергии  $E$  УХН имеем

$$E = K - \vec{\mu}_n \cdot \vec{B}, \quad (9.8)$$

где  $K$  — кинетическая энергия УХН.

Когда полная энергия УХН «плохой» поляризации отрицательна (т. е.  $K < |\vec{\mu}_n \times \vec{B}|$ ), нейтроны плохой поляризации отражаются от потенциального барьера. При  $K \sim 10^{-7}$  эВ и магнитном моменте нейтрона  $\mu_n = g_n \mu_N / 2 \approx 6 \cdot 10^{-12}$  эВ/Гс (где  $1/2$  — спин нейтрона,  $g_n \approx -3,8$  — фактор Ланде для нейтрона, а  $\mu_N \sim 3 \times 10^{-23}$  эВ/Гс — ядерный магнетон), магнитная индукция, необходимая для того, чтобы пластинка работала как спиновый поляризатор для УХН, составляет

$$B \approx 1,7 \cdot 10^4 \text{ Гс.}$$

Величина, легко достигаемая с помощью обычных ферромагнитных материалов.

### 9.3. Экспоненциально растущее/затухающее гармоническое поле

Спектр мощности экспоненциально затухающего гармонически осциллирующего поля — лоренциан (это относится, например, к спонтанному излучению, когда атом в момент  $t = 0$  приготовлен в возбужденном состоянии). Каким будет спектр, если мы добавим к временной эволюции поля его зеркальное отражение, т. е. добавим экспоненциально растущее поле при  $t < 0$  с той же характерной скоростью роста, что и скорость затухания?

Понимание связи между временной зависимостью сигнала и его спектром является важным, например, для понимания формы линии при пролетном уширении (задача 3.13). Здесь мы видим, что «нерезкое» возбуждение не только меняет ширину контура, но и искажает спектральную форму линии!

#### Решение

Фурье-образом экспоненциально затухающего гармонически осциллирующего поля является лоренциан

$$f_-(\omega) = \int_0^{\infty} e^{-\gamma t/2} \sin(\Omega t) e^{-i\omega t} dt = \frac{\Omega}{\frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega + (\Omega^2 - \omega^2)}, \quad (9.9)$$

где  $\gamma$  — скорость затухания интенсивности, а  $\omega$  — частота осцилляций. Фурье-образ  $f_+(\omega)$  экспоненциально растущего гармонически осциллирующего поля — также лоренциан:

$$f_+(\omega) = \int_{-\infty}^0 e^{\gamma t/2} \sin(\Omega t) e^{-i\omega t} dt = \frac{\Omega}{-\frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega - (\Omega^2 - \omega^2)}. \quad (9.10)$$

Если мы сложим эти два результата, мы получим для Фурье образа экспоненциально растущей и затем затухающей функции:

$$f_+(\omega) + f_-(\omega) = \frac{-2i\gamma\omega\Omega}{\frac{\gamma^4}{16} + (\Omega^2 - \omega^2)^2 + \frac{\gamma^2}{2}(\Omega^2 + \omega^2)}. \quad (9.11)$$

Чтобы получить спектр мощности, мы должны взять квадрат модуля  $f_+(\omega) + f_-(\omega)$ , что дает

$$|f_+(\omega) + f_-(\omega)|^2 = \frac{4\gamma^2\omega^2\Omega^2}{\left[\frac{\gamma^4}{16} + (\Omega^2 - \omega^2)^2 + \frac{\gamma^2}{2}(\Omega^2 + \omega^2)\right]^2}. \quad (9.12)$$

На рис. 9.2 полученный спектр мощности сопоставляется со спектром мощности экспоненциально затухающего гармонического поля. Спектр затухающего поля шире, чем спектр суммы растущего и затухающего полей. Эта разница связана с резким краем при  $t = 0$  для экспоненциально затухающего поля, который, как известно, имеет множество Фурье компонент.

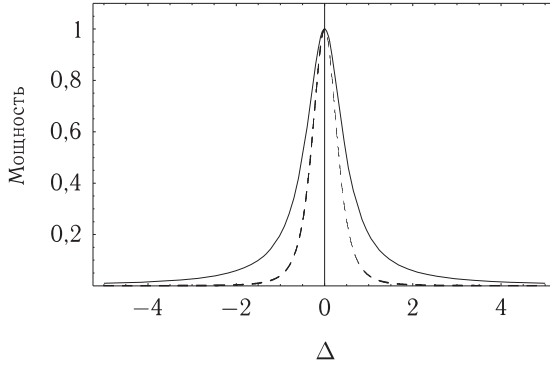


Рис. 9.2. Штриховая линия — спектр мощности экспоненциально растущего, а затем затухающего синусоидального поля ( $\gamma = 1$ , нормирован на единицу в резонансе); сплошная линия — спектр мощности экспоненциально затухающего синусоидального поля при  $\gamma = 1$

Спектр мощности экспоненциально затухающего гармонического поля описывается выражением

$$|f_-(\omega)|^2 = \frac{\Omega^2}{\frac{\gamma^4}{16} + (\Omega^2 - \omega^2)^2 + \frac{\gamma^2}{2}(\Omega^2 + \omega^2)}. \quad (9.13)$$

Если воспользоваться приближениями  $\Omega, \omega \gg \gamma, \Delta$  (где  $\Delta = \Omega - \omega$ ), то спектр мощности для растущего и затухающего гармонического поля приобретает вид:

$$|f_+(\omega) + f_-(\omega)|^2 \approx \frac{4\gamma^2}{(4\Delta^2 + \gamma^2)^2}, \quad (9.14)$$

в то время как для затухающего поля:

$$|f_-(\omega)|^2 \approx \frac{1}{4\Delta^2 + \gamma^2}. \quad (9.15)$$

Как видно из сравнения выражений (9.14) и (9.15), спектр мощности обычного лоренциан спадает как  $\Delta^{-2}$ , тогда как спектр мощности растущего и затухающего поля спадает как  $\Delta^{-4}$ .

### 9.4. Магический угол

В этой задаче мы даем несколько примеров, когда приходится сталкиваться с так называемым «магическим углом», который дается выражением

$$\theta_m = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \approx 54,74^\circ, \quad (9.16)$$

и обсуждаем возможные связи между ними.

**(а) Векторная модель спина 1/2.** В квантово-механической векторной модели состояние с угловым моментом  $F$  и магнитным квантовым числом  $M$  представляется вектором длиной  $\hbar\sqrt{F(F+1)}$ , с хорошо определенной проекцией ( $\hbar M$ ) на ось квантования. Однако, полный вектор углового момента, как следствие неопределенности поперечных компонент, «размывается» по конической поверхности.

Рассмотрим случай  $F = 1/2$ . Чему равен угол раствора конуса?

**(б) Поляризованная флуоресценция.** Рассмотрим эксперимент по резонансной флуоресценции, когда атомы возбуждаются линейно поляризованным светом, а испущенный свет, прежде, чем достигнуть фотоприемника, пропускается через линейный поляризатор. В общем случае (см., например, задачу 3.8), испущенное излучение данной поляризации пространственно анизотропно.

Показать, что, если вектор поляризации возбуждающего света образует угол  $\theta_m$  (определяемый выражением (9.16)) с осью линейного поляризатора, установленного перед детектором, то регистрируемый сигнал оказывается нечувствительным к анизотропной части индикатрисы флуоресценции.

Обсудим кратко важное следствие этого свойства для измерений времен жизни возбужденных состояний. Пусть для возбуждения перехода из основного состояния  $|g\rangle$  в возбужденное состояние  $|e\rangle$  мы используем лазерный импульс, существенно более короткий, чем время жизни возбужденного состояния, и наблюдаем временную зависимость интенсивности флуоресценции, связанной с распадом состояния  $|e\rangle$ . Часто бывает удобно наблюдать распад состояния на третий уровень  $|f\rangle$ , а не на  $|g\rangle$ , в частности потому, что это позволяет легко подавить сигнал, связанный с попаданием на фотоприемник рассеянного лазерного света.

В то время как для одиночного состояния  $|e\rangle$  временная зависимость интенсивности флуоресценции представляет собой затухающую экспоненту, в случае, когда возбуждаются несколько близко-расположенных подуровней  $|e\rangle$  (например, связанных со сверхтонкой структурой), может появиться модуляция на вершине экспоненциально затухающего сигнала, известная как *квантовые биения*, с частотами, соответствующими энергетическим зазорам между возбужденными подуровнями. (Обзор квантовых биений можно найти в [Haroche (1976), Corney (1988)] и [Alexandrov и др. (1993)]).

В некоторых случаях, когда, например, не известны константы сверхтонкого взаимодействия для состояния  $|e\rangle$ , квантовые биения между компонентами сверхтонкой структуры могут представлять трудности для измерения времени жизни состояния

$|e\rangle$ . Однако, важное свойство квантовых биений состоит в том, что они всегда связаны с пространственным перераспределением излучения и никогда не проявляются в *полной* интенсивности излучения (это может быть доказано с помощью метода фейнмановских диаграмм (Приложение Н) и детально обсуждается в книге [Alexandrov и др. (1993), гл. 3.8–3.9]). Таким образом, используя геометрию возбуждения «магического угла», можно измерить временную зависимость полной интенсивности, свободную от систематических эффектов, связанных с квантовыми биениями.

**(в)** *Исключение диполь-дипольного взаимодействия в ЯМР.* Ширина линии в *ядерном магнитном резонансе* (ЯМР; в качестве обстоятельного введения см. [Slichter (1990)]) часто ограничивается *диполь-дипольным взаимодействием* между разными ядрами, что описывается гамильтонианом

$$H = -\vec{m}_b \cdot \vec{B}_a(\vec{r}) = \frac{\vec{m}_a \cdot \vec{m}_b - 3(\vec{m}_a \cdot \hat{r})(\vec{m}_b \cdot \hat{r})}{r^3}, \quad (9.17)$$

где  $\vec{m}_{a,b}$  — магнитные моменты соответствующих ядер,  $\vec{B}_a$  — магнитное поле, создаваемое магнитным моментом  $\vec{m}_a$  (который считается расположенным в начале координат) в точке  $\vec{r}$  расположения второго ядра;  $\hat{r}$  — единичный вектор, направленный по  $\vec{r}$ .

Эксперименты по ЯМР обычно проводятся в присутствии сильного поляризующего магнитного поля (которое мы будем считать направленным по оси  $\hat{z}$ ). В этом случае все компоненты векторов магнитных моментов, отличные от  $z$ -компонент, при усреднении обращаются в ноль. Из соотношения (9.17) мы видим, что диполь-дипольное взаимодействие зависит от расположения ядер. Например, если вектор  $\vec{r}$  направлен вдоль  $\hat{z}$ , то мы имеем

$$H = -2 \frac{(m_a)_z (m_b)_z}{r^3}, \quad (9.18)$$

тогда как при  $\vec{r}$  вдоль  $\hat{x}$  или  $\hat{y}$  мы получаем

$$H = + \frac{(m_a)_z (m_b)_z}{r^3}. \quad (9.19)$$

Показать, что если образец непрерывно вращается вокруг оси, которая наклонена на угол  $\theta_m$  (см. Формулу (9.16)) по отношению к оси  $z$ , то усредненный по времени гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия обращается в ноль. Это — широко распространенный метод, позволявший реализовать высокое спектральное разрешение в исследованиях ЯМР.

**(г)** *Что тут общего?* В приведенных выше примерах (и в задаче 2.1) мы видели, как магический угол (9.16) обнаруживает себя в различных ситуациях, не связанных друг с другом очевидным образом. К этому списку можно добавить любую задачу, где мы сталкиваемся с полиномами Лежандра, например, в задачах электростатики и магнитостатики на собственные значения [Jackson (1975), гл. 3] и в квантовомеханических задачах для частицы, находящейся в центральном потенциале. Действительно, полином Лежандра

$$P_2 = \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \quad (9.20)$$

обращается в ноль при  $\theta = \theta_m$ .



Обсудить вопрос о том, означает ли появление магического угла во всех этих разнообразных задачах существование между ними глубокой физической связи?

### Подсказка

Чтобы показать в п. (б), что геометрия магического угла нечувствительна к пространственной анизотропии излучателя, можно рассмотреть различные тензорные компоненты  $|e\rangle$ , которые могут возбуждаться из неполяризованного состояния  $|g\rangle$ ; а также какие тензорные компоненты могут быть зарегистрированы по флуоресценции в данной геометрии.

### Решение

(а) При  $F = 1/2$  длина вектора углового момента в единицах  $\hbar$  составляет

$$\sqrt{F(F+1)} = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (9.21)$$

Например, в состоянии с  $M = 1/2$ ,  $1/2$  — это тоже высота конуса. Угол полураствора конуса определяется тригонометрически:  $\theta_{1/2} = \theta_m$  из соотношения (9.16).

(б) Мы рассматриваем случай слабого широкополосного возбуждения (т. е. спектральная ширина импульса возбуждения превосходит расстояние между подуровнями состояния  $|e\rangle$  и ширину первоначально неполяризованного основного состояния  $|g\rangle$ ). Какова поляризация возбужденного состояния  $|e\rangle$ ? Поскольку основное состояние деполаризовано, то поляризация возбужденного состояния соответствует поляризации фотона, т. е. вдобавок к населенности (компоненте нулевого ранга матрицы плотности возбужденного состояния, см. Приложение G), в общем случае, могут также присутствовать ориентация (компоненты первого ранга) и выстраивание (компоненты второго ранга). В случае линейно поляризованного света ориентация отсутствует (как ясно из симметричных соображений — в пространстве нет выделенного полярного направления). Следовательно, единственный член, который может привести к анизотропии излучения — это выстраивание. Более того, выбирая ось квантования вдоль направления поляризации возбуждения, мы можем заключить из симметричных соображений, что анизотропия соответствует  $\kappa = 2$ ,  $q = 0$ , где  $\kappa$  и  $q$  — ранг тензора и его компонента, соответственно. Что мы можем сказать о пространственном распределении флуоресценции? Интенсивность регистрируемого излучения (при заданном расстоянии между фотоприемником и источником излучения) зависит от взаимной ориентации излучаемой и регистрируемой поляризации. Согласно теореме Вигнера–Эккарта (Приложение F), при пространственных вращениях анизотропия должна преобразовываться как собственная функция углового момента  $\kappa$  и проекции  $q$ , т. е. в этом случае, как  $Y_2^0(\theta)$ . (Здесь  $\theta$  — угол между испускаемой и регистрируемой поляризациями.) Следовательно, для интенсивности регистрируемого излучения, мы имеем

$$I(\theta, \phi, t) \propto A + B(t)Y_2^0(\theta, \phi), \quad (9.22)$$

где коэффициенты  $A$  и  $B(t)$  (зависящие от конкретной системы) описывают, соответственно, изотропную и анизотропную части излучения, а  $Y_2^0(\theta, \phi)$  — сферическая гармоника. Заметим, что, как следует из симметрии задачи (а, следовательно, и функции  $Y_2^0(\theta, \phi)$ ), испускаемый свет изотропен по отношению к  $\phi$ . Из выражения (9.22) с очевидностью следует, что анизотропная часть обращается в ноль

после интегрирования по всем направлениям поляризации излучаемого света и что квантовые биения возникают благодаря временной зависимости анизотропной части.

И, наконец, поскольку

$$Y_2^0(\theta) \propto P_2[\cos(\theta)] = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1), \quad (9.23)$$

где  $P_2[\cos(\theta)]$  — полином Лежандра, мы приходим к выводу, что анизотропная часть (и, соответственно, сверхтонкие квантовые биения) не наблюдаются в геометрии магического угла, когда  $\theta = \theta_m$ <sup>1)</sup>.

Строгое рассмотрение тензорного разложения матрицы плотности возбужденного состояния (Приложение G) можно найти в работе [Haroche (1976)] и в приведенных в ней ссылках.

**(в)** Поскольку  $x$ - и  $y$ -компоненты магнитного момента, благодаря присутствию сильного поляризующего магнитного поля, направленного вдоль оси  $\hat{z}$ , зануляются в результате усреднения, мы можем переписать гамильтониан (9.17) в виде:

$$H = -\frac{m_z(a)m_z(b)}{r^3}(1 - 3\cos^2\theta_r), \quad (9.24)$$

где  $\theta_r$  — угол между  $\vec{r}$  и осью  $z$ .

Допустим, что мы вращаем образец вокруг оси ( $z'$ ), проходящей через начало координат и наклоненной на угол  $\theta$  относительно оси  $z$  (рис. 9.3). Для целей настоящего анализа удобно выбрать направления двух других осей штрихованной системы координат таким образом, чтобы вращение вокруг оси  $y'$  на угол  $\theta$  совмещало ось  $z'$  с осью  $z$ .

Пусть  $\beta$  — угол между  $\vec{r}$  и  $\hat{z}'$ , а  $\phi_0$  — начальный угол в плоскости вращения, как показано на рис. 9.3. Координаты радиус-вектора в штрихованной системе координат равны:

$$x' = r \sin \beta \cos(\phi_0 + \omega t), \quad (9.25)$$

$$y' = r \sin \beta \sin(\phi_0 + \omega t), \quad (9.26)$$

$$z' = r \cos \beta. \quad (9.27)$$

Мы хотим найти усредненный по времени гамильтониан (9.24), поэтому мы должны найти  $\bar{z}$  Применяя матрицу вращения на угол  $-\theta$  вокруг оси  $y'$

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (9.28)$$

мы получаем

$$z = r \cos \theta_r = r[-\sin \theta \sin \beta \cos(\phi_0 + \omega t) + \cos \beta \cos \theta], \quad (9.29)$$

<sup>1)</sup> Заметим, что, если направление наблюдения фиксировано по отношению к поляризации возбуждающего света, оказывается не всегда возможным установить угол между поляризациями возбуждения и детектирования равным  $\theta_m$  путем подстройки ориентации поляризатора, установленного перед фотоприемником. Чтобы это было возможно, угол наблюдения должен лежать в пределах  $\pm\theta_m$  от экваториальной плоскости.

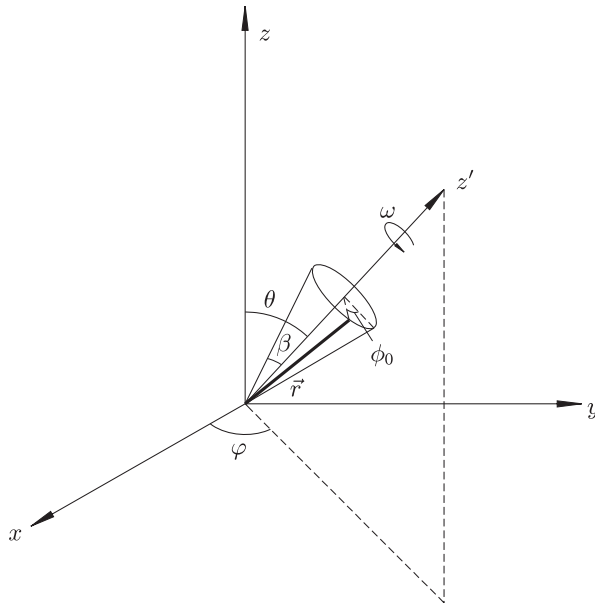


Рис. 9.3. Геометрия для расчета влияния вращения на диполь-дипольное взаимодействие

откуда имеем

$$\cos \theta_r = [-\sin \theta \sin \beta \cos (\phi_0 + \omega t) + \cos \beta \cos \theta], \quad (9.30)$$

что, после возведения в квадрат и усреднения по периоду вращения (и несложных алгебраических преобразований), дает

$$\overline{H} = \frac{m_z(a)m_z(b)}{r^3} \cdot \frac{1}{2}(1 - 3 \cos^2 \theta)(1 - 3 \cos^2 \beta). \quad (9.31)$$

При  $\theta = \theta_m$  диполь-дипольное взаимодействие зануляется при любом  $\beta$ .

**(г)** Читатель, ожидающий найти здесь определенный ответ, может быть разочарован, поскольку мы можем только высказать наши соображения.

Некоторые связи очевидны и проистекают из того факта, что, если уравнения, описывающие разные явления, одинаковы, то и решения этих уравнений, описывающие поведение различных систем, будут также одинаковы. Например, уравнение Лапласа появляется и в задачах электро- и магнитостатики, и при решении уравнения Шрёдингера для центросимметричного поля. В других случаях, проиллюстрированных в пп. (а)–(в), уравнения не кажутся идентичными, и их общность, по крайней мере, не очевидна, если не учитывать тот факт, что величина магического угла в каждом примере тесно связана с размерностью пространства.

Один из основных замыслов этой книги состоял в демонстрации универсальности физических идей, лежащих в основе внешне совершенно различных явлений, а также мощи аналогий и симметричных соображений. Мы не думаем, однако, что этот подход должен быть возведен в ранг «нумерологии». По какой причине число  $\pi$  появляется в таком большом числе различных ситуаций? (Если это не очевидно, то как насчет числа 2?)

### 9.5. Понимание правил отбора по коэффициентам Клебша–Гордона

Рассмотрим электрический (магнитный) дипольный переход  $F = 1 \rightarrow F' = 1$ . Согласно теореме Вигнера–Экарта (Приложение F), амплитуда перехода между зеемановскими подуровнями  $M$  и  $M'$  пропорциональна произведению приведенного матричного элемента на коэффициент Клебша–Гордона:

$$\langle F, M, 1, M' - M | F', M' \rangle = \langle 1, M, 1, M' - M | 1, M' \rangle. \quad (9.32)$$

При  $M = M' = 0$  коэффициент Клебша–Гордона обращается в ноль, что означает, что поляризованное по оси  $z$  электрическое (магнитное) поле не возбуждает переход  $M = 0 \rightarrow M' = 0$  (рис. 9.4). Найти физическое объяснение этого результата, важного для многих экспериментов по оптической накачке (см., например, задачи 3.9 и 4.8).

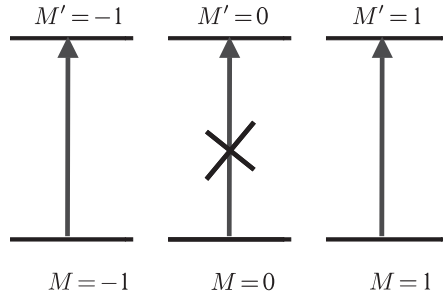


Рис. 9.4. Дипольные переходы между состояниями  $M = M' = 0$  являются запрещенными для переходов  $F \rightarrow F$  (в данном случае  $F = 1$ )

#### Решение

В физике элементарных частиц частицы с собственным угловым моментом, равным единице, называются *векторными* частицами. Их внутреннее состояние может быть полностью описано с помощью *вектора поляризации*. Связь между направлением вектора поляризации и квантовым числом  $M$  можно установить, вспомнив знакомый нам случай фотона (см. табл. 9.1).

Когда мы объединяем две частицы с угловым моментом единица в составную систему, мы должны построить волновую функцию объединенной системы из вол-

Таблица 9.1

Соответствие между квантовым числом  $M$  и направлением вектора поляризации для частицы с собственным угловым моментом, равным единице

$M$	Вектор поляризации
$-1$	$\propto \hat{x} - i\hat{y}$
$0$	$\propto \hat{z}$
$+1$	$\propto \hat{x} + i\hat{y}$

новых функций составляющих. Составная волновая функция должна быть линейной по отношению к волновым функциям составляющих.

Объединяя две частицы с угловым моментом единица, мы можем получить  $F = 0$  (скаляр),  $F = 1$  (вектор) или  $F = 2$  (тензор). В данном случае мы должны объединять исходное состояние атома со спином единица с фотоном, чтобы получить вектор (т. е. конечное состояние со спином единица). Теперь, при заданных векторах поляризации  $\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_2$ , получить вектор можно лишь одним способом:

$$\vec{e} \propto \vec{e}_1 \times \vec{e}_2. \quad (9.33)$$

Но для случая начального состояния  $M = 0$  и фотона, поляризованного вдоль оси  $z$ , оба вектора  $\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_2$  — параллельны  $\hat{z}$  (см. табл. 9.1), и векторное произведение (9.33) оказывается тождественно равным нулю.

Иными словами, амплитуда процесса, при котором две частицы со спином единица и с поляризационными векторами  $\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_2$  объединяются в частицу со спином единица с поляризационным вектором  $\vec{e}$ , должна быть линейной по всем трем векторам поляризации. Единственная такая возможность представляется скаляром

$$A \propto (\vec{e}_1 \times \vec{e}_2) \cdot \vec{e}, \quad (9.34)$$

который обращается в ноль, когда все три вектора направлены вдоль оси  $\hat{z}$ .

Рассматриваемое в этой задаче правило отбора является частным случаем более общего правила отбора  $\langle F, 0, 1, 0 | F, 0 \rangle = 0$ , которое означает, что дипольные переходы  $M = 0 \rightarrow M' = 0$  запрещены при любых  $F = F'$ .

Происхождение общего правила отбора можно понять, анализируя свойства коэффициентов Клебша–Гордона. Состояние  $|F', M'\rangle$  образуется при объединении углового момента фотона с угловым моментом нижнего состояния  $F$  в соответствии с разложением Клебша–Гордона:

$$|F', M'\rangle = \sum_M \langle F, M, 1, q = M' - M | F', M' \rangle |F, M\rangle |1, q\rangle. \quad (9.35)$$

Очевидно, что никакие физические свойства системы не должны зависеть от направления выбранной нами оси квантования, поэтому, если мы сравним разложение Клебша–Гордона для состояния  $|F', -M'\rangle$ ,

$$\begin{aligned} |F', -M'\rangle &= \sum_M \langle F, -M, 1, -q = M - M' | F', -M' \rangle |F, -M\rangle |1, -q\rangle = \\ &= \pm \sum_M \langle F, M, 1, q = M' - M | F', M' \rangle |F, -M\rangle |1, -q\rangle, \end{aligned} \quad (9.36)$$

с разложением (9.35), мы увидим, что модули коэффициентов Клебша–Гордона должны удовлетворять соотношению

$$|\langle F, M, 1, q | F', M' \rangle| = |\langle F, -M, 1, -q | F', -M' \rangle|. \quad (9.37)$$

Поскольку коэффициенты Клебша–Гордона являются вещественными, то это равенство превращается либо в

$$\langle F, M, 1, q | F', M' \rangle = \langle F, -M, 1, -q | F', -M' \rangle, \quad (9.38)$$

либо в

$$\langle F, M, 1, q | F', M' \rangle = -\langle F, -M, 1, -q | F', -M' \rangle. \quad (9.39)$$

Можно показать (используя, например, операторы понижения и повышения), что при  $F' = F + 1$  выполняется соотношение (9.38), тогда как при  $F' = F$  эти коэффициенты связаны соотношением (9.39) со знаком минус. В результате мы имеем

$$\langle F, 0, 1, 0 | F, 0 \rangle = -\langle F, 0, 1, 0 | F, 0 \rangle, \quad (9.40)$$

что доказывает, что коэффициент Клебша–Гордона  $\langle F, 0, 1, 0 | F, 0 \rangle$  равен нулю и, следовательно, дипольные переходы  $M = 0 \rightarrow M' = 0$  запрещены при любых  $F = F'$ .

## 9.6. Маятник Капицы

В этой задаче мы обсудим замечательный эффект стабилизации гармонического движения вблизи точки неустойчивого равновесия путем приложения высокочастотного возмущения. Этот эффект хорошо известен в механике (*маятник Капицы*), а также лежит в основе квадрупольных масс-спектрометров и так называемых ловушек Поля для заряженных частиц [Paul и др. (1958), Paul (2990), Gosh (1995)]. Он также широко используется в ускорителях частиц, например, в квадрупольных ВЧ ускорителях ионов [Humphries (1986)].

Движение без трения точечной массы  $m$  ограничено окружностью радиуса  $R$  в вертикальной плоскости.

**(а)** Чему равна частота  $\Omega_0$  малых колебаний этой системы около точки равновесия ( $\varphi = 0$ ) в отсутствие сил, отличных от сил гравитации?

Напомним, что идея «маятника Капицы» предполагает, что периодическая сила величиной  $f \sin(\omega t)$  (при  $\omega \gg \Omega_0$ ) приложена к массе в вертикальном направлении (см. рис. 9.5). Будем считать, что амплитуда «быстрого» дрожания массы меньше амплитуды «медленных» осцилляций.

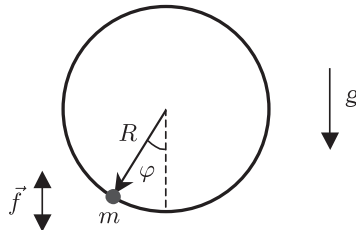


Рис. 9.5. Маятник Капицы

**(б)** Найти поправку  $\Omega - \Omega_0$  к частоте «медленных» осцилляций маятника.

**(в)** Показать, что когда амплитуда силы  $f$  достаточно велика (сколь велика?), точка  $\varphi = \pi$ , в дополнение к точке  $\varphi = 0$ , также становится точкой устойчивого равновесия.

**(г)** Найти частоту малых колебаний вблизи положения  $\varphi = \pi$ .

**Решение**

(а) Это — обычный маятник, так что

$$\Omega_0 = \sqrt{\frac{g}{R}}. \quad (9.41)$$

(б) Поскольку движения массы ограничено окружностью, единственной актуальной компонентой силы может служить тангенциальная составляющая

$$f_t = f \sin(\omega t) \sin \varphi. \quad (9.42)$$

Движение массы включает в себя быструю дрожь (с частотой  $\omega$ ) и медленные колебания (с частотой  $\approx \Omega_0$ ). Записывая  $\varphi(t)$  в виде  $\varphi(t) = \varphi_s(t) + \varphi_f(t)$  (где индексы обозначают медленное (slow) и быстрое (fast) движение), мы получаем общее уравнение движения для этой системы (так называемое *уравнение Матье*):

$$\ddot{\varphi}_s + \ddot{\varphi}_f = \left[ -\frac{g}{R} + \frac{f}{mR} \sin(\omega t) \right] \sin(\varphi_s + \varphi_f). \quad (9.43)$$

Принимая, что  $\varphi_f \ll 1$ , мы можем воспользоваться разложением первого порядка по малому параметру:

$$\ddot{\varphi}_s + \ddot{\varphi}_f = \left[ -\frac{g}{R} + \frac{f}{mR} \sin(\omega t) \right] \cdot (\sin \varphi_s + \varphi_f \cos \varphi_s). \quad (9.44)$$

Чтобы найти быстрое движение, мы можем пренебречь медленным движением и просто сделать предположение, что быстрые осцилляции происходят в окрестности квазистационарного значения  $\varphi_s$ . В первом порядке мы имеем:

$$\ddot{\varphi}_f = \frac{f}{mR} \sin(\omega t) \sin \varphi_s, \quad (9.45)$$

$$\varphi_f = -\frac{f}{mR\omega^2} \sin(\omega t) \sin \varphi_s, \quad (9.46)$$

где на последнем шаге мы отбросили постоянные интегрирования, не вносящие вклада в быстрые осцилляции. Теперь вернемся к уравнению (9.44) и подставим результаты (9.45) и (9.46). Усредняя быстро осциллирующие члены, мы получаем

$$\ddot{\varphi}_s = -\frac{g}{R} \sin \varphi_s - \frac{f^2}{2m^2 R^2 \omega^2} \cos \varphi_s \sin \varphi_s. \quad (9.47)$$

Из формулы (9.47) видно, что частота малых медленных осцилляций около  $\varphi_s = 0$  дается выражением

$$\Omega = \sqrt{\frac{g}{R} + \frac{f^2}{2m^2 R^2 \omega^2}}. \quad (9.48)$$

(в) Посмотрим, как выглядит формула (9.47) вблизи  $\varphi_s = \pi$ . Вводя  $\varphi' = \varphi_s - \pi$ ,  $\varphi' \ll 1$ , мы получаем

$$\ddot{\varphi}' = \left( \frac{g}{R} - \frac{f^2}{2m^2 R^2 \omega^2} \right) \varphi'. \quad (9.49)$$

Осциллирующее решение получается, когда величина в скобках в формуле (9.49) отрицательна.

(г) Мы получаем

$$\Omega = \sqrt{-\frac{g}{R} + \frac{f^2}{2m^2 R^2 \omega^2}}. \quad (9.50)$$

## 9.7. Визуализация атомной поляризации

В этой задаче мы кратко остановимся на технике визуализации атомной поляризации путем изображения трехмерной поверхности, соответствующей распределению вероятности вектора углового момента [Rochester и Budker (2001)]<sup>1)</sup>. Этот метод особенно полезен для понимания симметричных свойств мультипольных моментов высоких порядков и для понимания временной эволюции атомной поляризации в процессе квантовых биений.

Для того чтобы визуализировать поляризационное состояние атомов с полным угловым моментом  $F$ , мы должны нарисовать поверхность, расстояние  $r$  которой от начала координат пропорционально вероятности обнаружения проекции момента  $M = F$  вдоль соответствующего радиального направления. Чтобы найти величину радиуса в направлении, определяемом углами Эйлера  $\theta$  и  $\varphi$ , мы должны повернуть матрицу плотности  $\rho$  (Приложение G) таким образом, чтобы ось квантования совпала с этим направлением:

$$\rho(\theta, \varphi) = \mathcal{D}(\varphi, \theta, 0) \rho(\theta = 0, \varphi = 0) \mathcal{D}^{-1}(\varphi, \theta, 0) \quad (9.51)$$

и затем взять элемент  $\rho_{F=M, F=M}$ :

$$r(\theta, \varphi) = \rho(\theta, \varphi)_{F, F}. \quad (9.52)$$

Здесь  $\mathcal{D}(\varphi, \theta, 0)$  — соответствующая квантово-механическая матрица поворота (Приложение E).

**(а)** Изобразить индикатрису вероятности для ансамбля неполяризованных атомов.

**(б)** Изобразить индикатрису вероятности для ансамбля атомов в вытянутом состоянии  $F = 1$ ,  $M = 1$ . Какие мультиполи состояния здесь присутствуют<sup>2)</sup>? (См. Приложение G.)

**(в)** Изобразить поверхность вероятности для ансамбля атомов в состоянии  $F = 1$ ,  $M = 0$ . Какие мультиполи состояния присутствуют в этом случае?

**(г)** Эта методика может быть особенно полезна при рассмотрении динамического поведения атомной поляризации (квантовых биений) в присутствии внешних полей.

<sup>1)</sup> Подобный подход применялся для описания молекулярной поляризации и ее эволюции [Auzinsh и Farber (1995)] и для анализа анизотропии, вносимой в атомы и молекулы эллиптически поляризованным светом [Milner и Prior (1999)].

<sup>2)</sup> Мультиполи состояния обычно используются для описания атомной поляризации и, как отмечалось выше, процедура визуализации поляризации позволяет видеть симметрию системы. Это, в свою очередь, помогает понять оптические свойства поляризованной атомной системы (см., например, обзор [Budker и др. (2002)]).



В то время как поведение поляризованного ансамбля атомов в присутствии магнитного поля может быть визуализировано непосредственным образом (это — всего лишь ларморова прецессия, см. задачу 2.6), явление квантовых биений, обусловленных приложенным электрическим полем (штарковские биения) визуализируются значительно сложнее.

Рассмотрим атомы с  $F = 1$ , первоначально находящиеся в состояниях, растянутых вдоль оси  $\hat{y}$ . Пусть электрическое поле  $\vec{E}$  приложено вдоль оси  $\hat{z}$ . Для описания эволюции атомной поляризации использовать методы визуализации атомной поляризации.

### Решение

(а) Для неполяризованного образца вероятность найти атом в растянутом состоянии  $|F, M = F\rangle$  одинакова при любом выборе оси квантования. Следовательно, индикатриса вероятности представляет собой сферу, т. е.  $r(\theta, \varphi)$  — постоянная (рис. 9.6).

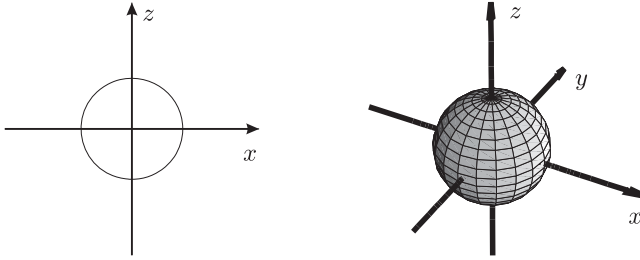


Рис. 9.6. Двумерное сечение и трехмерная поверхность, представляющие атомную поляризацию для неполяризованной атомной системы

(б) Матрица плотности  $\rho(0, 0)$  (с осью квантования вдоль  $z$ ), описывающая ансамбль атомов с полным угловым моментом  $F = 1$ , находящихся на зеемановском подуровне  $M = 1$ , имеет вид

$$\rho(0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.53)$$

Матрица поворота  $\mathcal{D}(\varphi, \theta, 0)$  описывается выражением (Приложение Е)

$$\mathcal{D}(\varphi, \theta, 0) = \mathcal{D}(0, \theta, 0) \cdot \mathcal{D}(\varphi, 0, 0) = \quad (9.54)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\varphi} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{i\varphi} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (9.55)$$

и мы получаем  $\mathcal{D}(\varphi, \theta, 0)^{-1}$  (необходимое для уравнения (9.51)) путем последовательного выполнения «обратных» вращений:

$$\mathcal{D}(\varphi, \theta, 0)^{-1} = \mathcal{D}(-\varphi, 0, 0) \cdot \mathcal{D}(0, -\theta, 0) = \quad (9.56)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{-i\varphi} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{i\varphi} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (9.57)$$

Таким образом, матрица плотности в повернутой системе координат имеет вид:

$$\rho(\varphi, \theta) = \mathcal{D}(\varphi, \theta, 0) \rho(0, 0) \mathcal{D}^{-1}(\varphi, \theta, 0) =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(1 + \cos \theta)^2 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin \theta(1 + \cos \theta) & \frac{1}{4}(1 - \cos^2 \theta) \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin \theta(1 + \cos \theta) & \frac{1}{2} \sin^2 \theta & \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin \theta(1 - \cos \theta) \\ \frac{1}{4}(1 - \cos^2 \theta) & \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin \theta(1 - \cos \theta) & \frac{1}{4}(1 - \cos \theta)^2 \end{pmatrix}. \quad (9.58)$$

Следовательно, в соответствии с выражением (9.52) индикатриса вероятности описывается формулой

$$r(\theta, \varphi) = \frac{1}{4}(1 + \cos \theta)^2. \quad (9.59)$$

Заметим, что поскольку здесь отсутствует зависимость от  $\varphi$ , атомная поляризация имеет цилиндрическую симметрию относительно оси  $z$ . Это распределение вероятности представлено графически на рис. 9.7.

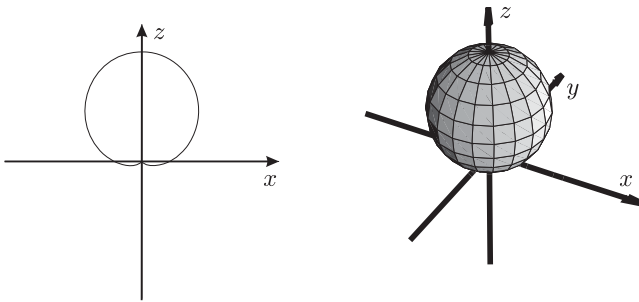


Рис. 9.7. Двумерное сечение и трехмерная поверхность, представляющие атомную поляризацию для ансамбля атомов, находящихся на зеемановском подуровне  $M = 1$  состояния с полным угловым моментом  $F = 1$ . Расстояние поверхности от начала координат задается функцией  $r(\theta, \varphi)$  из выражения (9.59)

Обсуждение, приведенное в Приложении Г, показывает, что максимально возможная мультипольность соответствует  $\kappa = 2$  (квадрупольный момент или выстраивание). Мультиполи состояния, рассчитанные по формуле (G.54), приведены в табл. 9.2.

Таблица 9.2

Значения различных мультипольных моментов для ансамбля атомов, находящихся на зеемановском подуровне  $M = 1$  состояния с полным угловым моментом  $F = 1$ . Верхний индекс соответствует рангу мультиполя  $\kappa$ , а нижний индекс — компонента  $q$ . Отметим, что здесь присутствуют мультиполи всех возможных рангов

	Мультиполь	Значение
Монополь	$\rho_0^{(0)}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
Диполь (ориентация)	$\rho_1^{(1)}$	0
	$\rho_0^{(1)}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
	$\rho_{-1}^{(1)}$	0
Квадруполь (выстраивание)	$\rho_2^{(2)}$	0
	$\rho_1^{(2)}$	0
	$\rho_0^{(2)}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
	$\rho_{-1}^{(2)}$	0
	$\rho_{-2}^{(2)}$	0

**(в)** Следуя той же процедуре, которую мы применяли в п. (а), для ансамбля, описываемого матрицей плотности

$$\rho(0,0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.60)$$

мы получаем

$$r(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta. \quad (9.61)$$

Соответствующая индикатриса вероятности показана на рис. 9.8. Значения мультипольных моментов представлены в табл. 9.3. В этом случае, как и следует из соображений симметрии, ориентация отсутствует.

Индикатрисы вероятности могут быть полезными для визуализации симметрии, характеризующей атомный ансамбль, и для понимания его оптических свойств. Например, ансамбль атомов, который описывается индикатрисой поляризации, изображенной на рис. 9.7, очевидно, имеет выделенное направление — ось  $\hat{z}$ . Можно ожидать, что такой ансамбль будет обладать циркулярным двулучепреломлением и циркулярным дихроизмом для света, распространяющегося вдоль оси  $z$ . Рисунок 9.7 наглядно демонстрирует, что в состоянии  $M = 1$  находится больше атомов, чем в состоянии  $M = -1$ , так что можно ожидать, что показатели преломления для право- и левоциркулярно поляризованного света могут быть различными. Это, действительно, является общим свойством ансамблей атомов с выделенным направлением.

Таблица 9.3

Значения различных мультипольных моментов для ансамбля атомов на зеемановском подуровне  $M = 0$  состояния с полным угловым моментом  $F = 1$

	Мультиполь	Значение
Монополь	$\rho_0^{(0)}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
Диполь (ориентация)	$\rho_1^{(1)}$	0
	$\rho_0^{(1)}$	0
	$\rho_{-1}^{(1)}$	0
Квадруполь (выстраивание)	$\rho_2^{(2)}$	0
	$\rho_1^{(2)}$	0
	$\rho_0^{(2)}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
	$\rho_{-1}^{(2)}$	0
	$\rho_{-2}^{(2)}$	0

Аналогичным образом, ансамбль атомов, который описывается индикатрисой вероятности, показанной на рис. 9.8, очевидно, должен обладать линейным дихроизмом и линейным двулучепреломление для света, распространяющегося вдоль оси  $x$  или  $y$ .

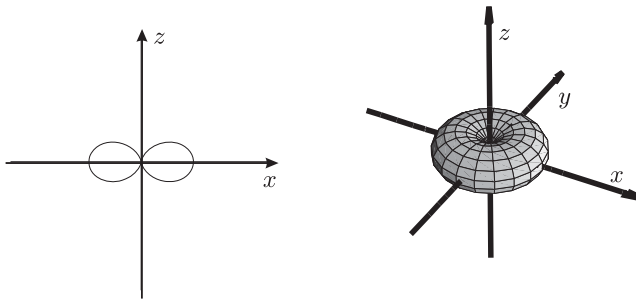


Рис. 9.8. Двумерное сечение и трехмерная поверхность, представляющая атомную поляризацию ансамбля атомов, находящихся на зеемановском подуровне  $M = 0$  состояния с полным угловым моментом  $F = 1$

Этот метод особенно полезен для ансамблей, обладающих высокими значениями ( $\kappa > 2$ ) поляризационных моментов, симметрия которых может не быть очевидной из вида матрицы плотности (см., например, [Yashchuk и др. (2003)] и [Budker и др. (2003)]).

(**р**) В качестве первого шага запишем матрицу плотности для вытянутого состояния, ориентированного вдоль оси  $\hat{y}$ . Начать можно с матрицы плотности состояния, вытянутого вдоль  $\hat{z}$  (соотношение (9.53)), и затем повернуть соответствующим образом систему координат. В соответствии с Приложением Е, выраженное в углах Эйлера вращение должно составлять  $\beta = -\pi/2$  и  $\gamma = -\pi/2$ , как это видно из рис. 9.9.

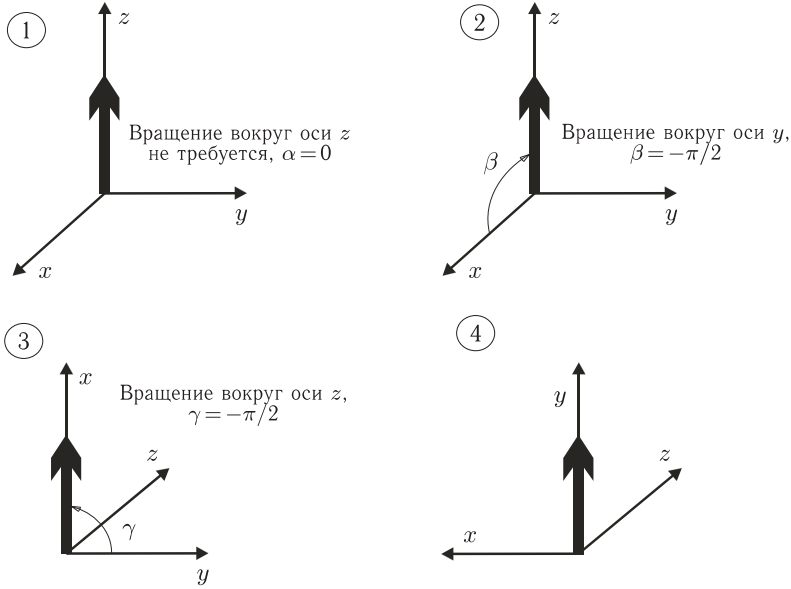


Рис. 9.9. Вращение системы координат на углы Эйлера  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  для преобразования атомной системы, поляризованной по оси  $\hat{z}$ , в систему, поляризованную вдоль оси  $\hat{y}$

Таким образом, матрица плотности, описывающая систему в момент времени  $t = 0$ , имеет вид

$$\rho(t=0) = \mathcal{D}\left(0, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{D}^{-1}\left(0, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right) = \quad (9.62)$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (9.63)$$

На следующем шаге мы воспользуемся уравнением Лиувилля (Приложение Г), чтобы определить временную зависимость элементов матрицы плотности. Атомная поляризация эволюционирует вследствие квадратичного штарковского сдвига зеемановских подуровней, и нам остается только учесть эффект тензорной поляризуемости  $\alpha_2$  (поскольку скалярный сдвиг смещает одинаково все подуровни), который описывается формулой (см. задачу 2.11):

$$H(M) = -\alpha_2 \frac{\mathcal{E}^2}{2} \frac{3M^2 - F(F+1)}{F(2F-1)}, \quad (9.64)$$

и для атома с  $F = 1$  мы имеем:

$$H = -\frac{\alpha_2 \mathcal{E}^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (9.65)$$

Подставляя (9.65) в уравнение Лиувилля (G.44)

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho],$$

мы получаем следующую систему дифференциальных уравнений (в матричной форме):

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{10} & \rho_{1-1} \\ \rho_{01} & \rho_{00} & \rho_{0-1} \\ \rho_{-11} & \rho_{-10} & \rho_{-1-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\omega_S \rho_{10} & 0 \\ -i\omega_S \rho_{01} & 0 & -i\omega_S \rho_{0-1} \\ 0 & i\omega_S \rho_{-10} & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.66)$$

где

$$\omega_S = \frac{2\pi}{\tau_S} = \frac{3\alpha_2 \mathcal{E}^2}{2\hbar} \quad (9.67)$$

— штарковское расщепление (а, следовательно, и частота штарковских биений). Эти дифференциальные уравнения являются независимыми, и их решение приводит

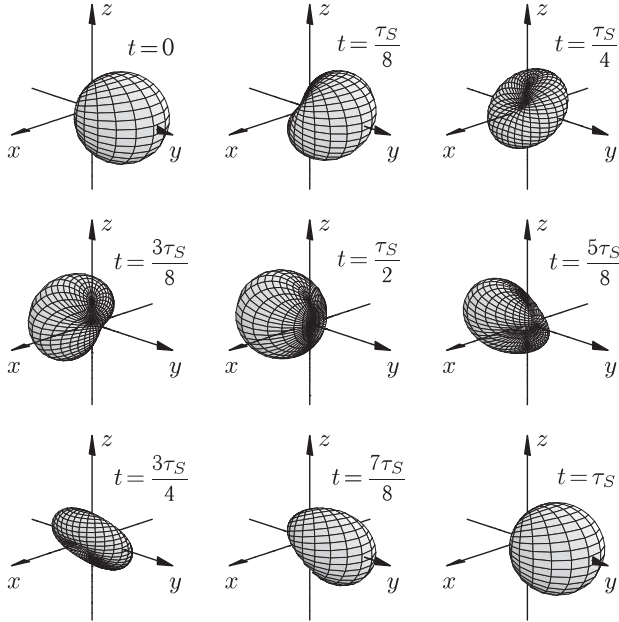


Рис. 9.10. Последовательность индикатрис вероятности, представляющих индуцированную электрическим полем эволюцию состояния с  $F = 1$ . Первоначально состояние выстроено вдоль  $\hat{y}$ , а электрическое поле направлено вдоль  $\hat{z}$ , индуцируя штарковские биения с периодом  $\tau_S$ . При  $t = 0$ , как легко видеть, атомная поляризация такая же, как рассмотренная в п. (б) этой задачи, за исключением того, что состояние выстроено вдоль оси  $\hat{y}$ , а не вдоль  $\hat{z}$  (сравни с рис. 9.7). При  $t = \tau_S/4$ , как мы видим, ансамбль выстроен вдоль оси  $\hat{x} + \hat{z}$  (сравни с рис. 9.8), затем при  $t = \tau_S/2$  ансамбль приобретает ориентацию в направлении  $-\hat{y}$ , при  $t = 3\tau_S/4$  ансамбль демонстрирует выстраивание вдоль  $\hat{z} - \hat{x}$  и, наконец, при  $t = \tau_S$  система возвращается к состоянию своей начальной поляризации. По ходу этой эволюции можно видеть, как оптические свойства системы меняются по мере того, как меняется симметрия атомной поляризации. Рисунок из книги [Rochester и Budker (2001)]

к зависящей от времени матрице плотности

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & \rho_{10}(0)e^{i\omega st} & \rho_{1-1}(0) \\ \rho_{01}(0)e^{-i\omega st} & \rho_{00}(0) & \rho_{0-1}(0)e^{-i\omega st} \\ \rho_{-11}(0) & \rho_{-10}(0)e^{i\omega st} & \rho_{-1-1}(0) \end{pmatrix}. \quad (9.68)$$

И наконец, последний шаг состоит в том, чтобы применить метод визуализации для того чтобы увидеть воочию временную эволюцию атомной поляризации. Подставляя начальные значения элементов матрицы плотности  $\rho_{M,M'}$  из (9.63) в уравнение (9.68) и поворачивая полученную матрицу плотности на углы  $\theta$  и  $\varphi$ , мы получаем (после ряда алгебраических преобразований) для радиус-вектора индикатрисы вероятности (уравнение (9.52)):

$$r(\theta, \varphi, t) = \frac{1}{32} [10 - 2 \cos(2\theta) + \cos(2(\theta - \varphi)) - 2 \cos(2\varphi) + \cos(2(\theta + \varphi)) + \\ + 16 \sin \theta \sin \varphi \cos \omega st + 8 \cos \varphi \sin 2\theta \sin \omega st]. \quad (9.69)$$

Эта поверхность изображена на рис. 9.10 для нескольких моментов времени  $t$ . Заметим, что тогда как исходное состояние обладает как ориентацией, так и выстраиванием (вдоль  $y$ ), в процессе эволюции система проходит через состояния (см. изображения для  $t = \tau_S/4$  и  $t = 3\tau_S/4$ ), обладающие только выстраиванием. Это пример преобразования ориентации в выстраивание (см. статью [Budker и др. (2002)] и ссылки в ней).

# Приложение А

## ЕДИНИЦЫ, КОЭФФИЦИЕНТЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И НЕКОТОРЫЕ ТИПИЧНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ

В этом Приложении мы перечисляем некоторые употребляемые единицы, коэффициенты преобразования и типичные значения разных параметров, которые, на наш взгляд, являются практически полезными. Принцип формирования предлагаемого списка является, в значительной степени, делом индивидуальным, зависящим от того, как каждый практикующий физик формирует «портфель» своих интересов.

### Атомные единицы

*Длина* = радиус Бора =  $a_0$ :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,5292 \text{ \AA}, \quad (\text{A.1})$$

где  $m$  и  $e$  — масса и величина заряда электрона, соответственно.

*Энергия* = удвоенный потенциал ионизации атома водорода:

$$\frac{e^2}{a_0} = \frac{me^4}{\hbar^2} = \alpha^2 \cdot mc^2 \approx 27,21 \text{ эВ}, \quad (\text{A.2})$$

где  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137,036$  — постоянная тонкой структуры.

Постоянная Ридберга  $R_\infty$  в волновых числах

$$R_\infty = \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{2\pi\hbar c} \approx 1,09737 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}, \quad (\text{A.3})$$

где  $\infty$  обозначает, что мы считаем массу ядра бесконечной.

*Скорость* = скорость электрона на первой боровской орбите:

$$\frac{e^2}{\hbar} = \alpha c. \quad (\text{A.4})$$

*Время*:

$$\frac{a_0}{\alpha c} = \frac{\hbar^3}{me^4} \approx 2,419 \cdot 10^{-17} \text{ с}. \quad (\text{A.5})$$

Эти типичные масштабы различных атомных параметров образуют систему «атомных единиц» в которой  $\hbar = e = m = 1$ . Это приводит к скорости света, равной  $c = \alpha^{-1} = 137,036$  в атомных единицах, и вышеприведенные величины представляют собой единицы длины, энергии, скорости и времени.



### Электрический дипольный момент $ea_0$

$$ea_0 \approx 2,54 \cdot 10^{-18} \text{ ГГС} \cdot \text{см.} \quad (\text{A.6})$$

В молекулярной физике электрический дипольный момент обычно выражается в единицах

$$\text{Debye} = 10^{-18} \text{ ГГС} \cdot \text{см}, \quad (\text{A.7})$$

тогда как атомной единицей электрического дипольного момента служит  $ea_0$ ,

$$\frac{ea_0}{h} \approx 1,28 \frac{\text{МГц}}{\text{В/см}}. \quad (\text{A.8})$$

Когда мы вычисляем сдвиг энергетических уровней вследствие эффекта Штарка (статического или динамического), мы должны умножить электрический дипольный момент на электрическое поле. Часто оказывается удобным выразить это произведение в единицах частоты. Связь между единицами электрического поля имеет вид:

$$1 \text{ ГГС} = 300 \text{ В/см}. \quad (\text{A.9})$$

### Магнетон Бора $\mu_0$

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{e^2}{2\hbar c} \cdot \frac{e\hbar^2}{me^2} = \frac{\alpha}{2} \cdot ea_0, \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\mu_0}{h} \approx 1,40 \text{ МГц/Гс}. \quad (\text{A.11})$$

### Выражение магнитных моментов через $\mu_0$

*Магнитный момент электрона:*

$$\mu_e \approx -\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right)\mu_0 \approx -1,00116\mu_0. \quad (\text{A.12})$$

*Магнитный момент протона:*

$$\mu_p \approx 2,793 \cdot \mu_N \approx \frac{2,793}{1836} \mu_0, \quad (\text{A.13})$$

где  $\mu_N = e\hbar/(2m_p c)$  ( $m_p$  — масса протона) — ядерный магнетон, а  $m_p/m \approx 1836$ .

*Магнитный момент нейтрона:*

$$\mu_n \approx -1,913 \cdot \mu_N \approx -\frac{1,913}{1836} \mu_0. \quad (\text{A.14})$$

### Напряженность электрического поля в световом пучке

Интенсивность  $I$  в световом пучке, усредненная по периоду колебаний поля, описывается средним вектором Пойнтинга

$$I = \langle |\vec{S}| \rangle = \frac{1}{2} \frac{c}{4\pi} |\vec{\mathcal{E}} \times \vec{H}| = \frac{1}{2} \frac{c}{4\pi} \mathcal{E}^2, \quad (\text{A.15})$$

где  $\mathcal{E}$  — амплитуда электрического поля световой волны,

$$I \left( \frac{\text{мВт}}{\text{см}^2} \right) = 10^{-4} \frac{\text{мВт}}{\text{эрг/с}} \cdot I \left( \frac{\text{эрг/с}}{\text{см}^2} \right) \approx 1,33 \cdot [E(\text{В/см})]^2. \quad (\text{A.16})$$

При расчете динамического эффекта Штарка или скоростей переходов, индуцированных лазерным излучением, обычно требуется амплитуда электрического поля световой волны. Приведенное соотношение связывает это электрическое поле с общепринятыми «лабораторными» единицами интенсивности лазерного пучка.

### Число фотонов в световом пучке

Для непрерывного светового пучка с интенсивностью  $I$ , площадью сечения  $A$  и с длиной волны  $\lambda$  число фотонов, падающих в секунду на поверхность, дается выражением

$$\frac{dN}{dt} \approx 3,93 \cdot 10^{15} \cdot I \left( \frac{\text{мВт}}{\text{см}^2} \right) \cdot A(\text{см}^2) \cdot \frac{\lambda(\text{нм})}{780}. \quad (\text{A.17})$$

Число фотонов в световом импульсе с энергией  $U$  равно

$$N \approx 3,93 \cdot 10^{15} \cdot U(\text{мДж}) \cdot \frac{\lambda(\text{нм})}{780}. \quad (\text{A.18})$$

Соотношения (A.17) и (A.18) нормированы на резонансную длину волны линии Rb D2.

### Параметр насыщения для типичного атомного перехода

Сила взаимодействия между резонансным излучением и двухуровневой системой можно охарактеризовать параметром насыщения (задача 3.7):

$$\kappa = \frac{d^2 \mathcal{E}^2}{\hbar^2 \gamma_0^2} \rightarrow 1,23 \times \frac{[d(ea_0)]^2 I \left( \frac{\text{мВт}}{\text{см}^2} \right)}{\left[ \frac{\gamma_0}{2\pi} (\text{МГц}) \right]^2}. \quad (\text{A.19})$$

Здесь  $d$  — дипольный момент перехода,  $\mathcal{E}$  и  $I$  — амплитуда и интенсивность электрического поля световой волны, а  $\gamma_0$  — однородная ширина перехода.

### Произведение постоянной Планка на скорость света $\hbar c$

$$\hbar c \approx 3,16 \cdot 10^{-17} \text{ эрг} \cdot \text{см} \approx 197,3 \text{ МэВ} \cdot \text{фм} \approx 197,3 \text{ эВ} \cdot \text{нм}. \quad (\text{A.20})$$

### Единицы магнитного поля

$$1 \text{ Тл} = 10^4 \text{ Гс}; \quad 1 \gamma = 10^{-5} \text{ Гс}. \quad (\text{A.21})$$

В вакууме магнитная индукция  $B$  (Гс) равна напряженности магнитного поля  $H$  (Э). В системе СИ единица магнитной индукции — Тесла (Тл). В геофизике и магнитометрии обычно используемая единица — гамма,  $\gamma$ .

Магнитное поле внутри длинного соленоида с плотностью намотки  $n$  витков на сантиметр и с током  $i$  равно

$$\begin{aligned} H(\text{Э}) &= \frac{4\pi n}{c} i(\text{СГС}) \approx \\ &\approx \frac{4\pi n}{3 \cdot 10^{10}} i(\text{А}) \cdot 3 \cdot 10^9 \text{ СГС/А} \approx \\ &\approx \frac{4\pi}{10} n(\text{витков/см}) \cdot i(\text{А}). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Это соотношение определяет другую широко используемую единицу магнитного поля

$$1 \text{ А} \times \text{витков} \times \text{см}^{-1} = 4\pi/10 \text{ Э} \approx 1,26 \text{ Э}. \quad (\text{A.23})$$

### Единицы энергии

$$1 \text{ эВ} \approx 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 1,60 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \approx \\ \approx hc \cdot 8066 \text{ см}^{-1} \approx h \cdot 2,41 \cdot 10^{14} \text{ Гц.} \quad (\text{A.24})$$

$$1 \text{ см}^{-1} \times c = 30 \text{ ГГц.} \quad (\text{A.25})$$

Преобразование (A.25) получено из соотношений между частотой  $\nu$  и длиной волны  $\lambda$ :  $\nu = c/\lambda$ .

Температура, соответствующая энергии 1 эВ, составляет

$$T = E/k_B \approx 11600 \text{ К.} \quad (\text{A.26})$$

Здесь  $k_B \approx 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К}$  — постоянная Больцмана.

### Плотность газа

$$1 \text{ тор} \approx 1,33 \cdot 10^3 \text{ дин/см}^2 \quad (\text{A.27})$$

— это давление столбика ртути высотой 1 мм (на поверхности Земли),

$$N(\text{см}^{-3}) = \frac{P(\text{дин/см}^2)}{k_B T} \approx 9,66 \cdot 10^{18} \frac{P(\text{тор})}{T(\text{К})}. \quad (\text{A.28})$$

Здесь  $T$  (К) — абсолютная температура. При комнатной температуре ( $T = 293 \text{ К}$ )

$$N(\text{см}^{-3}) \approx 3,3 \cdot 10^{16} P(\text{тор}). \quad (\text{A.29})$$

При стандартных условиях [ $P = 760 \text{ тор}$ ,  $T = 273 \text{ К}$  ( $0^\circ \text{C}$ )], один моль газа ( $N_A \approx 6,02 \cdot 10^{23}$  молекул) занимает объем  $\approx 22,4 \text{ л} = 2,24 \cdot 10^4 \text{ см}^3$ .

### Доплеровская ширина

Доплеровская ширина, определяемая как  $\Gamma_D = 2\pi\nu \cdot v_T/c$ , где  $\nu$  — частота перехода, а  $v_T = (2k_B T/m)^{1/2}$  — тепловая скорость, для атомов массой  $M$  (в атомных единицах — а. е. м.) при температуре  $T$  (К) дается формулой

$$\Gamma_D \approx 2\pi \times 306 \text{ МГц} \times \frac{780 \text{ нм}}{\lambda(\text{нм})} \times \sqrt{\frac{T(\text{К})}{293 \text{ К}}} \times \frac{85}{M(\text{а. е. м.})}. \quad (\text{A.30})$$

В (A.30) все параметры, от которых зависит доплеровская ширина, нормированы на соответствующие параметры перехода D2 в  $^{85}\text{Rb}$  при комнатной температуре ( $v_T \approx 2,39 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ ).

### Уширение давлением

В литературе уширение давлением часто выражается в единицах  $\text{см}^{-1}/\text{амага}$  или в  $\text{МГц}/\text{амага}$ . Число *амага* (или *относительное давление*) — это отношение плотности газа к плотности стандартной атмосферы ( $\approx 2,69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ).

Типичные сечения для уширения давлением равны

$$\sigma \sim 10^{-15} \text{ см}^2 \quad (\text{A.31})$$

(хотя в некоторых особых случаях эти сечения могут отклоняться от приведенных значений на несколько порядков величины в обе стороны). Скорость ушибляющих столкновений можно оценить по формуле

$$\Gamma \sim N\sigma v_T. \quad (\text{A.32})$$

Для гелия при комнатной температуре мы получаем  $\Gamma \sim 8 \cdot 10^3$  МГц/амага. Некоторые авторы предпочитают использовать давление на единицу давления, а не на единицу плотности. Наш пример соответствует  $\sim 10$  МГц/тор.

#### **«Время жизни» эксперимента**

Всегда полезно помнить, что существует только

$$\approx \pi \cdot 10^7 \text{ с в году,}$$

и Ваше финансирование завершится через 3–5 лет, если Вы не получите результата, так что для выполнения эксперимента Вы располагаете временем порядка  $10^8$  с.

# Приложение В

## СПРАВОЧНЫЕ ДАННЫЕ ПО АТОМАМ ВОДОРОДА И ЩЕЛОЧНЫМ АТОМАМ

Происхождение термина D-линия не связано, как можно подумать, с тем фактом, что D-линии щелочных атомов являются дублетами. Когда Джозеф фон Фраунгофер выполнял свои пионерские исследования темных линий, наблюдаемых в спектре солнечного света, в начале 19-го столетия, он не знал происхождения этих линий и просто обозначил их буквами А, В, С и т. д. Позднее D-линия была увязана с переходом в атоме натрия.

Таблица В.1

Параметры низкоэнергетических резонансных переходов из основного состояния для атома водорода ( $1s \rightarrow 2p_{1/2,3/2}$ ) и для атомов щелочных металлов (переходы D1 (D2) —  $ns \rightarrow np_{1/2(3/2)}$ ). Длины волн даны для вакуума,  $\|d_J\|$  — приведенный матричный элемент в  $J$ -базисе

Атом	Верхнее состояние	Энергия, см <sup>-1</sup>	Длина волны, нм	Время жизни, нс	$\ d_J\ , ea_0$
H	$2^2P_{1/2}$	82258,91	121,5674	1,60	1,05
	$2^2P_{3/2}$	82259,27	121,5668	1,60	1,49
Li	$2^2P_{1/2}$	14903,66	670,976	26,9	3,33
	$2^2P_{3/2}$	14904,00	670,961	26,9	4,71
Na	$3^2P_{1/2}$	16956,18	589,755	16,2	3,54
	$3^2P_{3/2}$	16973,38	589,158	16,1	5,01
K	$4^2P_{1/2}$	12985,17	770,109	26,2	4,15
	$4^2P_{3/2}$	13042,89	766,701	26,1	5,84
Rb	$5^2P_{1/2}$	12578,96	794,978	27,6	4,24
	$5^2P_{3/2}$	12816,56	780,241	26,2	5,99
Cs	$6^2P_{1/2}$	11178,24	894,595	34,8	4,51
	$6^2P_{3/2}$	11732,35	852,344	30,7	6,79
Fr	$7^2P_{1/2}$	12236,66	817,216	29,5	4,28
	$7^2P_{3/2}$	13923,20	718,226	21,0	5,91

## Приложение С

### СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ АТОМОВ И ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Атомные состояния принято описывать, используя спектроскопические обозначения (см., например, задачу 1.1), включающие в себя спиновую мультиплетность  $(2S + 1)$ , полный орбитальный угловой момент  $(L)$  и полный электронный угловой момент  $(J)$  в следующем виде:

$$^{2S+1}L_J.$$

Точно так же и для одноэлектронных состояний, вместо того чтобы использовать числа, для обозначения  $L$  принято использовать буквы:

$$\begin{array}{lll} L = 0 & \rightarrow & S \\ L = 1 & \rightarrow & P \\ L = 2 & \rightarrow & D \\ L = 3 & \rightarrow & F \\ L = 4 & \rightarrow & G \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \end{array}$$

где для  $L \geq 3$  последовательность букв продолжается в алфавитном порядке (за исключением того, что буква  $J$  пропускается). Например, атомное состояние с  $S = 1$ ,  $L = 2$  и  $J = 3$  обозначается как  $^3D_3$ .

Аналогичные спектроскопические обозначения приняты для описания электронных состояний двухатомных молекул. Однако существует ряд тонких особенностей, различающих переходы в атомах и в молекулах.

Прежде всего, в молекулах полный угловой момент электронов не сохраняется из-за взаимодействия между движением ядер и электронов. Однако двухатомные молекулы обладают аксиальной симметрией относительно оси, проходящей через два ядра. Это означает, что проекция углового момента на эту *ось молекулы* сохраняется. Таким образом, молекулярные термы могут классифицироваться по абсолютной величине этой проекции  $\Lambda$ . По аналогии с обозначениями различных значений  $L$  в атоме, для двухатомных молекул мы имеем

$$\begin{array}{lll} \Lambda = 0 & \rightarrow & \Sigma \\ \Lambda = 1 & \rightarrow & \Pi \\ \Lambda = 2 & \rightarrow & \Delta \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \end{array}$$

Второе. Хотя параметр  $\Lambda$  обозначает абсолютную величину проекции орбитального углового момента на ось молекулы, он ничего не говорит нам о знаке этой проекции<sup>1)</sup>. Если молекулу отразить от плоскости, содержащей ее ось, знак этой проекции изменится. При вторичном отражении от этой плоскости молекула вернется в свое первоначальное состояние, что означает, что такое отражение может изменить только знак волновой функции. Молекулярным состояниям, волновые функции которых меняют знак при отражении, приписывается знак «-», а не меняющим знак — «+».

Как и в атомах, в молекулах мы должны учитывать полный спин электронов. Эта дополнительная степень вырождения обозначается точно так же, как и в атомах. Таким образом, спектроскопическое обозначение электронного терма двухатомной молекулы имеет вид:

$$^{2S+1}\Lambda^{\pm}. \quad (\text{C.1})$$

Часто оказывается также полезным включить в обозначение абсолютную величину проекции (на ось молекулы) полного электронного углового момента (спиновый плюс орбитальный, аналог числа  $J$  для атомов), обозначаемую как  $\Omega$ . Это число используется в спектроскопическом обозначении в качестве нижнего индекса:

$$^{2S+1}\Lambda_{\Omega}^{\pm}. \quad (\text{C.2})$$

И наконец, если ядра двухатомной молекулы идентичны (*гомоядерные молекулы* или *димеры*, например,  $\text{N}_2$ ), молекула оказывается симметричной относительно центра масс. Если мы совершаем преобразование, инвертирующее положение электронов  $\vec{r}$  относительно центра масс ( $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ), квадрат волновой функции должен остаться неизменным<sup>2)</sup>. Волновые функции, которые не меняют знак при таком преобразовании, называют четными (*gerade*,  $g$ ), а те, которые меняют знак — нечетными (*ungerade*,  $u$ ). Эти обозначения ( $g$  и  $u$ ) используются в качестве дополнительных нижних индексов. Так что полное спектроскопическое обозначение для гомоядерной двухатомной молекулы имеет вид:

$$^{2S+1}\Lambda_{\Omega, g/u}^{\pm}. \quad (\text{C.3})$$

<sup>1)</sup> В некоторых работах допускаются отрицательные значения  $\Lambda$ , но здесь мы используем более распространенное соглашение [Herzberg (1989)].

<sup>2)</sup> Отметим, что это преобразование не эквивалентно пространственному преобразованию четности ( $P$ ), которое мы, в частности, обсуждали в задаче 3.13. Преобразование  $P$  инвертирует положение электронов и ядер, тогда как преобразование, о котором идет речь сейчас, инвертирует только положение электронов.

## Приложение D

### ОПИСАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ СВЕТА

#### D.1. Параметры Стокса

Общепринятая параметризация состояний поляризации света (см., например, [Huard (1997)]) базируется на использовании параметров Стокса  $P_i$ , определяемых через непосредственно измеряемые интенсивности света:

$$\begin{aligned}P_0 &= I_x + I_y = I_0, \\P_1 &= I_x - I_y, \\P_2 &= I_{+\pi/4} - I_{-\pi/4}, \\P_3 &= I_+ - I_-, \end{aligned} \tag{D.1}$$

где  $I_x$  и  $I_y$  — усредненные по времени интенсивности света, пропущенного идеальным линейным поляризатором, направление пропускания которого ориентировано соответственно вдоль оси  $x$  и вдоль оси  $y$  (считается, что свет распространяется вдоль оси  $z$ ),  $I_{\pm\pi/4}$  — интенсивности света, проходящего через поляризатор, ориентированный под углом  $\pm\pi/4$  к осям  $x$  и  $y$ , а  $I_+$  и  $I_-$  — интенсивности света, пропущенного соответственно правым и левым циркулярным поляризатором.

Параметры Стокса можно также записать в нормированном виде:

$$S_i = P_i/P_0, \quad i = 1, 2, 3. \tag{D.2}$$

Тогда как строго монохроматический свет всегда поляризован, в общем случае свет может быть и деполаризованным<sup>1)</sup> (так что единственной ненулевой компонентой вектора Стокса будет  $P_0$ ) или частично поляризованным. Степень поляризации света ( $0 \leq p \leq 1$ ) определяется по формуле

$$p = \frac{\sqrt{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2}}{P_0}. \tag{D.3}$$

---

<sup>1)</sup> Несмотря на то что поляризованный свет часто рассматривают как некий специальный случай состояния света, а неполяризованный свет как «естественный», более точным будет утверждение, что неполяризованного света в природе вообще не существует. Любой наблюдаемый «неполяризованный» свет является результатом усреднения его поляризации по спектру, по пространству или по времени. — *Примеч. ред.*



## D.2. Метод расчета Джонса

Другое удобное представление поляризации света дается с помощью вектора Джонса (1941), который описывает комплексное поле

$$\vec{\mathcal{E}}(z, t) = \tilde{\mathcal{E}}_x e^{i(kz - \omega t)} \hat{x} + \tilde{\mathcal{E}}_y e^{i(kz - \omega t)} \hat{y}, \quad (\text{D.4})$$

где  $\tilde{\mathcal{E}}_x$  и  $\tilde{\mathcal{E}}_y$  — амплитуды комплексного поля, в виде вектора-столбца  $\mathbf{V}$ :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{E}}_x \\ \tilde{\mathcal{E}}_y \end{pmatrix}. \quad (\text{D.5})$$

Заметим, что в представлении Джонса отсутствует пространственная и временная зависимости фазы электромагнитного поля ( $kz - \omega t$ ), где  $k$  — волновой вектор, а  $\omega$  — частота света. Чтобы получить реальное поле, надо взять вещественную часть выражения (D.4).

Метод расчета Джонса особенно полезен для определения влияния линейных оптических элементов на интенсивность и поляризацию светового пучка. Каждый оптический элемент представляется матрицей  $2 \times 2$  (табл. D.1), действующей на вектор Джонса.

Таблица D.1

Матрицы Джонса различных оптических элементов [Djones (1941); см. также, например, [Fowles (1975)] и [Huard (1997)]. Матрицы Джонса  $M'$  для элемента, ось которого повернута на некоторый угол  $\theta$  вокруг оси  $z$ , может быть получена с помощью обычных (см. Приложение E) двумерных матриц поворота  $\mathcal{R}(\theta)$ :  $\mathbf{M}' = \mathcal{R}(-\theta) \cdot \mathbf{M} \cdot \mathcal{R}(\theta)$

Оптический элемент	Ось	Матрица Джонса
Линейный поляризатор	Ось пропускания $x$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
Четвертьволновая пластинка	Быстрая ось вдоль $x$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$
Полуволновая пластинка	Быстрая ось вдоль $x$ или $y$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

В качестве примера рассмотрим световой пучок, поляризованный в направлении  $x$ , проходящий через четвертьволновую пластинку, быстрая ось которой составляет угол  $45^\circ$  с направлением  $x$ . Матрица Джонса, описывающая четвертьволновую пластинку, может быть получена путем поворота матрицы из табл. D.1:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}'_{\lambda/4} &= \mathcal{R}(-\pi/4) \cdot \mathbf{M}_{\lambda/4} \cdot \mathcal{R}(\pi/4) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix} = \frac{1-i}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.6}) \end{aligned}$$

Общим фазовым множителем обычно можно пренебречь. В результате мы имеем

$$\mathbf{M}'_{\lambda/4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.7})$$

Окончательно получаем, что прошедший через четвертьволновую пластинку световой пучок обладает левой циркулярной поляризацией и описывается вектором Джонса  $\mathbf{V}' = \mathbf{M}'_{\lambda/4} \cdot \mathbf{V}$ :

$$\mathbf{V}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}. \quad (\text{D.8})$$

## Приложение Е

### УГЛЫ ЭЙЛЕРА И МАТРИЦЫ ПОВОРОТА

Произвольный поворот декартовой системы координат может быть описано тремя *углами Эйлера*  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . Мы рассматриваем правую систему координат и будем считать поворот вокруг оси положительным, если он приводит к перемещению правого винта в положительном направлении этой оси. Правая система координат произвольной ориентации может быть получена из системы координат первоначальной ориентации с помощью трех последовательных поворотов:

- поворот на угол  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ) вокруг оси  $z$ ;
- поворот на угол  $\beta$  ( $0 \leq \beta \leq \pi$ ) вокруг оси  $y'$  (т.е. вокруг оси  $y$  системы координат, получившейся после первого вращения);
- поворот на угол  $\gamma$  ( $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ ) вокруг оси  $z''$  (т.е. вокруг оси  $z$  системы координат, получившейся после двух предыдущих вращений).

Если в исходной системе координат точка описывалась координатами  $(x, y, z)$ , то ее координаты в повернутой системе координат могут быть найдены путем последовательного применения трех матриц поворота, соответствующих углам  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ :

$$\begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Для решения многих задач требуется знать, как квантово-механические волновые функции преобразуются при вращениях системы координат. Например, если мы имеем волновую функцию состояния с полным угловым моментом  $F$ , записанную в спинорных обозначениях, то как ее записать в новой системе координат? Общее решение этой задачи и детальное ее обсуждение можно найти, например, в книге [Edmonds (1996)]. Говоря кратко, новый спинор получается из исходного путем применения оператора

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\left(\frac{i\gamma}{\hbar} \hat{F}_z\right) \exp\left(\frac{i\beta}{\hbar} \hat{F}_y\right) \exp\left(\frac{i\alpha}{\hbar} \hat{F}_z\right), \quad (\text{E.2})$$

где показатель степени оператора определяется через разложение в ряд, например,

$$\exp\left(\frac{i\alpha}{\hbar} \hat{F}_z\right) = 1 + \frac{i\alpha}{\hbar} \hat{F}_z + \frac{1}{2} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 \hat{F}_z^2 + \dots \quad (\text{E.3})$$

При любом  $F$  экспоненциальные операторы для  $\alpha$  и  $\gamma$  являются диагональными, поэтому их эффект сводится к умножению компоненты спинора, отвечающей квантовому числу  $M$ , на  $\exp(iM\alpha)$  и  $\exp(iM\gamma)$  соответственно. Матрицы для  $\beta$  обычно недиагональны. Приводим их для  $F = 1/2$ :

$$\exp\left(\frac{i\beta}{\hbar} \hat{F}_y\right) = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & \sin \beta/2 \\ -\sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix}, \quad (\text{E.4})$$

и для  $F = 1$ :

$$\exp \frac{i\beta}{\hbar} \hat{F}_y = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}. \quad (\text{E.5})$$

В формулах (Е.4) и (Е.5) предполагается, что порядок компонент спинора соответствует уменьшению числа  $M$ . Применение этих матриц обсуждается, например, в задачах 4.3, 4.5, 4.8 и 9.7. Формулы для квантово-механических матриц вращения для произвольных  $F$  можно найти в книге [Edmonds (1996)] <sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> См., также, Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К., Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 439 с. — Примеч. ред.

## Приложение F

# ТЕОРЕМА ВИГНЕРА–ЭККАРТА И НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРЫ

### F.1. Теорема Вигнера–Эккарта

Для множества задач атомной физики стандартной процедурой является вычисление матричных элементов операторов между различными атомными состояниями. Важным инструментом выполнения таких вычислений служит *теорема Вигнера–Эккарта*<sup>1)</sup>, которая утверждает, что матричные элементы *неприводимого тензорного оператора* (точный смысл этого термина мы объясним позже)  $T_q^\kappa$  между базисными состояниями углового момента определяются произведением константы, не зависящей от магнитных квантовых чисел  $(m, m', q)$ , на соответствующий коэффициент Клебша–Гордона:

$$\langle \xi', j', m' | T_q^\kappa | \xi, j, m \rangle = \frac{\langle \xi', j' || T^\kappa || \xi, j \rangle}{\sqrt{2j' + 1}} \langle j, m, \kappa, q | j', m' \rangle, \quad (\text{F.1})$$

где величина

$$\langle \xi', j' || T^\kappa || \xi, j \rangle \quad (\text{F.2})$$

известна как приведенный матричный элемент<sup>2)</sup>. Мы используем стандартный базис углового момента  $|\xi, j, m\rangle$ :

$$J^2 |\xi, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\xi, j, m\rangle, \quad (\text{F.3})$$

$$J_z |\xi, j, m\rangle = \hbar m |\xi, j, m\rangle, \quad (\text{F.4})$$

где  $\xi$  учитывает все остальные квантовые числа.

Важность теоремы Вигнера–Эккарта состоит в том, что она явным образом разлагает матричные элементы на два сомножителя — приведенный матричный элемент  $\langle \xi', j' || T^\kappa || \xi, j \rangle$ , содержащий свойства конкретной физической наблюдаемой, и коэффициент Клебша–Гордона, определяемый только геометрией задачи, т. е. ори-

---

<sup>1)</sup> Мы здесь не приводим доказательства теоремы Вигнера–Эккарта, поскольку его можно найти в большинстве учебников по квантовой механике, таких, как [Sakurai (1994)] и [Messiah (1996)].

<sup>2)</sup> Существует и другое определение приведенного матричного элемента, используемое, правда, не столь широко, когда матричный элемент  $\langle \xi', j' || T^\kappa || \xi, j \rangle$  включает в себя множитель  $\sqrt{2j' + 1}$ . В этом случае теорема Вигнера–Эккарта приобретает вид

$$\langle \xi', j', m' | T_q^\kappa | \xi, j, m \rangle = \langle \xi', j' || T^\kappa || \xi, j \rangle \langle j, m, \kappa, q | j', m' \rangle.$$

В этой книге мы будем использовать определение (F.1).

ентацией физических наблюдаемых по отношению к оси квантования. Эта теорема полезна потому, что вся зависимость матричного элемента от магнитных квантовых чисел содержится в коэффициенте Клебша–Гордона. Это позволяет легко определять матричные элементы для всех значений  $q, m$  и  $m'$ , если известно одно частное решение.

Прежде чем продолжить, необходимо определить, что мы имеем в виду под неприводимым тензорным оператором. Здесь мы просто представим формальные математические определения и отложим на потом дальнейшие обсуждения тензоров и свойств приводимости.

Набор из  $2\kappa + 1$  операторов  $T_q^\kappa$ , где  $q = -\kappa, \dots, +\kappa$ , определяется как *неприводимый тензорный оператор*, если

$$[J_z, T_q^\kappa] = \hbar q T_q^\kappa, \quad (\text{F.5})$$

$$[J_\pm, T_q^\kappa] = \hbar \sqrt{\kappa(\kappa + 1) - q(q \pm 1)} T_{q\pm 1}^\kappa, \quad (\text{F.6})$$

где  $J_\pm$  — операторы повышения и понижения:

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad (\text{F.7})$$

$$J_- = J_x - iJ_y, \quad (\text{F.8})$$

так что

$$J_\pm |\xi, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |\xi, j, m \pm 1\rangle. \quad (\text{F.9})$$

Заметим, что соотношения (F.5) и (F.6) для неприводимых тензорных операторов аналогичны выражениям (F.4) и (F.9), где вместо того чтобы действовать оператором  $J_z$  или  $J_\pm$  на базисное состояние, мы образуем коммутатор с тензорным оператором. При изменении  $q$  от  $-\kappa$  до  $+\kappa$ , величины  $T_q^\kappa$  образуют  $2\kappa + 1$  компонент неприводимого тензорного оператора ранга  $\kappa$ . Из соотношений (F.5) и (F.6) можно также получить:

$$[J_i, [J_i, T_q^\kappa]] = \hbar^2 \kappa(\kappa + 1) T_q^\kappa, \quad (\text{F.10})$$

где подразумевается суммирование по повторяющемуся индексу  $i$ . Из приведенных соотношений видно, что  $\kappa$  является аналогом  $j$ , а  $q$  — аналогом  $m$ .

Чтобы прочувствовать теорему Вигнера–Эккарта в действии, полезно рассмотреть некоторые конкретные примеры. Для простоты исследуем матричные элементы между одним и тем же состоянием, представляющие собой просто средние значения физической наблюдаемой, которой соответствует оператор  $T_q^\kappa$ . В этом случае теорема Вигнера–Эккарта имеет вид:

$$\langle T_q^\kappa \rangle = \langle \xi, j, m | T_q^\kappa | \xi, j, m \rangle = \frac{\langle \xi, j | T^\kappa | \xi, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, m, \kappa, q | j, m \rangle. \quad (\text{F.11})$$

В качестве первого примера рассмотрим гамильтониан спин-орбитального взаимодействия  $H_{so} = A \vec{L} \cdot \vec{S}$  из задачи 1.3 для атома с полным угловым моментом  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Прежде всего, убедимся, что  $H_{so}$  является неприводимым тензорным

оператором  $\vec{J}$  и найдем его ранг <sup>1)</sup>. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия можно записать в виде (см. задачу 1.3, формула (1.32)):

$$H_{so} = \frac{A}{2}(J^2 - S^2 - L^2). \quad (\text{F.12})$$

Таким образом мы имеем

$$[J_z, H_{so}] = \frac{A}{2}([J_z, J^2] - [J_z, S^2] - [J_z, L^2]) = 0. \quad (\text{F.13})$$

Аналогичным образом можно показать, что  $[J_{\pm}, H_{so}] = 0$ . Следовательно,  $H_{so}$  действительно является неприводимым тензорным оператором с  $\kappa = 0$  и  $q = 0$ . Такой оператор называют *скалярным оператором*.

Что говорит теорема Вигнера–Эккарта о скалярных операторах типа  $H_{so}$ ? Из выражения (F.11) мы имеем:

$$\langle H_{so} \rangle = \frac{\langle \xi, j || H_{so} || \xi, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, m, 0, 0 | j, m \rangle. \quad (\text{F.14})$$

Коэффициент Клебша–Гордона равен единице,  $\langle j, m, 0, 0 | j, m \rangle = 1$ , откуда сразу видно, что среднее значение  $H_{so}$  не зависит от  $m$ . Это имеет смысл, поскольку различные зеемановские подуровни соответствуют различным ориентациям атомной системы относительно оси квантования, но  $\langle H_{so} \rangle$  от этой ориентации не зависит <sup>2)</sup>.

Может возникнуть мысль, что любая скалярная величина соответствует неприводимому тензорному оператору нулевого ранга. Однако оказывается, что это не так. Рассмотрим гамильтониан  $H_B$ , описывающий взаимодействие магнитного поля  $\vec{B}$  с атомным состоянием, имеющим магнитный момент  $\vec{\mu}$ :

$$H_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (\text{F.15})$$

Гамильтониан  $H_B$  — несомненно скаляр, но если бы это был неприводимый тензорный оператор нулевого ранга, то, согласно (F.14), все зеемановские подуровни имели бы одну и ту же энергию. Однако, как нам известно, это не так.

Суть дела состоит в том, что скалярный оператор, по определению, инвариантен при вращениях атомной системы по отношению к оси квантования. Когда атомная система поворачивается, направление магнитного дипольного момента  $\vec{\mu}$  меняется, тогда как внешнее магнитное поле  $\vec{B}$  остается фиксированным по отношению к оси квантования. Таким образом, магнитное поле нарушает сферическую симметрию.

<sup>1)</sup> Поскольку в определения (F.5) и (F.6) входит  $J$ , считается, что неприводимый тензор определяется по отношению к конкретному оператору углового момента, например,  $\vec{L}$ ,  $\vec{J}$ , или  $\vec{F}$ .

<sup>2)</sup> Заметим, что гамильтониан сверхтонкого взаимодействия, который мы рассматривали в задаче 1.11 ( $H_{\text{hf}} = a\vec{I} \cdot \vec{S}$ ), представляет собой скалярный оператор по отношению к полному угловому моменту  $\vec{F}$  (в общем случае, гамильтонианы, содержащие только внутренние атомные векторы типа  $\vec{I}$ ,  $\vec{L}$  и т.д., являются скалярными операторами). Это означает, что матричные элементы пропорциональны  $\langle F, M_F, 0, 0 | F', M_F' \rangle$  и  $H_{\text{hf}}$  может смешивать только состояния, для которых  $F = F'$  и  $M_F = M_F'$ .

Исходя из принципа инвариантности скалярных операторов по отношению к вращениям, скалярные операторы  $\mathcal{S}$  должны удовлетворять уравнению

$$[\vec{J}, \mathcal{S}] = 0. \quad (\text{F.16})$$

Легко убедиться в том, что если оператор  $\mathcal{S}$  коммутирует с  $\vec{J}$ , то он будет коммутировать с  $J_z$  и с  $J_{\pm}$ , тем самым удовлетворяя условиям (F.5) и (F.6) для неприводимого тензорного оператора с  $\kappa = 0$ .

Если мы направили ось квантования вдоль магнитного поля  $\vec{B}$ , то мы имеем:

$$H_B = g_J \mu_0 B J_z. \quad (\text{F.17})$$

С помощью соотношения (F.17) можно показать, что  $[\vec{J}, H_B] \neq 0$ , убедившись, что  $H_B$  не является неприводимым тензорным оператором.

Как с помощью теоремы Вигнера–Эккарта, можно найти среднее значение  $H_B$ ? Поскольку  $\vec{\mu} = g_J \mu_0 \vec{J}$  — *векторный оператор*, мы можем воспользоваться теоремой Вигнера–Эккарта, чтобы найти среднее значение  $\langle \vec{\mu} \rangle$ . Образова скалярное произведение  $\langle \vec{\mu} \rangle$  на  $\vec{B}$ , мы получаем  $\langle H_B \rangle$ .

Что такое векторный оператор? Векторный оператор  $\vec{V}$  определяется как вектор

$$\vec{V} = \mathcal{V}_x \hat{x} + \mathcal{V}_y \hat{y} + \mathcal{V}_z \hat{z}, \quad (\text{F.18})$$

удовлетворяющий соотношению

$$[J_i, \mathcal{V}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \mathcal{V}_k, \quad (\text{F.19})$$

где  $\epsilon_{ijk}$  — полностью антисимметричный тензор Леви-Чивита<sup>1)</sup>. Чтобы использовать теорему Вигнера–Эккарта, мы должны представить векторный оператор в виде неприводимого сферического тензора. Для этого распишем  $\vec{V}$  по компонентам сферического базиса:

$$\hat{e}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{y}), \quad (\text{F.20})$$

$$\hat{e}_0 = \hat{z}, \quad (\text{F.21})$$

$$\hat{e}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{y}), \quad (\text{F.22})$$

которые, как легко видеть, являются комплексными и ортонормированы ( $\hat{e}_q^* \cdot \hat{e}_{q'} = \delta_{qq'}$ ). Компоненты векторного оператора в сферическом базисе:

$$\mathcal{V}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{V}_x + i\mathcal{V}_y), \quad (\text{F.23})$$

$$\mathcal{V}_0 = \mathcal{V}_z, \quad (\text{F.24})$$

$$\mathcal{V}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{V}_x - i\mathcal{V}_y), \quad (\text{F.25})$$

<sup>1)</sup> Это определение теснейшим образом связано с тем фактом, что операторы углового момента являются генераторами бесконечно малых вращений [Sakurai (1994)].



являются компонентами неприводимого тензорного оператора первого ранга, для которого  $\kappa = 1$ , а  $q = 1, 0, -1$ . Вектор  $\vec{V}$  выражается через  $\mathcal{V}_q$  в виде

$$\vec{V} = \sum_q \mathcal{V}_q \hat{e}_q^*. \quad (\text{F.26})$$

Заметим, что скалярное произведение двух векторов  $\vec{a}$  и  $\vec{b}$ , выраженное в сферических координатах, имеет вид:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = (a_1 \hat{e}_1^* + a_0 \hat{e}_0^* + a_{-1} \hat{e}_{-1}^*) \cdot (b_1 \hat{e}_1^* + b_0 \hat{e}_0^* + b_{-1} \hat{e}_{-1}^*) = \quad (\text{F.27})$$

$$= (a_1 \hat{e}_1^* + a_0 \hat{e}_0^* + a_{-1} \hat{e}_{-1}^*) \cdot (-b_1 \hat{e}_{-1} + b_0 \hat{e}_0 - b_{-1} \hat{e}_1) = \quad (\text{F.28})$$

$$= -a_1 b_{-1} + a_0 b_0 - a_{-1} b_1 = \quad (\text{F.29})$$

$$= \sum_q (-1)^q a_q b_{-q}, \quad (\text{F.30})$$

где мы воспользовались тем обстоятельством, что  $\hat{e}_{\pm 1}^* = -\hat{e}_{\mp 1}$  (см. формулы (F.20) и (F.22)) и  $\hat{e}_q^* \cdot \hat{e}_{q'} = \delta_{qq'}$ .

Результат (F.30) может быть обобщен на неприводимые тензоры произвольного ранга  $\kappa$ :

$$T^{(\kappa)} \cdot U^{(\kappa)} = \sum_q (-1)^q T_q^\kappa U_{-q}^\kappa. \quad (\text{F.31})$$

Рассмотрим среднее значение векторного оператора  $\langle \vec{V} \rangle$ . Согласно теореме Вигнера–Эккарта (соотношение (F.11)), средние значения компонент  $\vec{V}$  удовлетворяют соотношению

$$\langle \mathcal{V}_q \rangle = \frac{\langle \xi, j || \mathcal{V} || \xi, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, m, 1, q | j, m \rangle. \quad (\text{F.32})$$

Отметим, что  $\vec{J}$  — это тоже векторный оператор (в этом можно убедиться, используя соотношение (F.19))<sup>1)</sup>, так что

$$\langle J_q \rangle = \frac{\langle \xi, j || J || \xi, j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, m, 1, q | j, m \rangle. \quad (\text{F.33})$$

Сравнивая выражения (F.32) и (F.33), мы видим, что

$$\langle \vec{V} \rangle \propto \langle \vec{J} \rangle. \quad (\text{F.34})$$

Следовательно, среднее векторное значение любого векторного оператора всегда направлено вдоль направления полного углового момента.

Этот результат можно интуитивно понять, рассматривая вектор  $\vec{v}$ , связанный с вращающейся системой (рис. F.1). Поскольку компоненты вектора, которые не направлены вдоль оси вращения, зануляются при усреднении, среднее значение векторной величины должно быть направлено вдоль оси вращения.

Теорема Вигнера–Эккарта применяется к множеству задач атомной физики, рассмотренных в этой книге. Теорема особенно полезна, когда требуется вычислять

<sup>1)</sup> Поскольку  $\vec{\mu} = g_J \mu_0 \vec{J}$  и  $\vec{J}$  — векторный оператор, то, следовательно, и  $\vec{\mu}$  — это векторный оператор. Это подтверждает высказанное нами выше утверждение, касающееся расчетов  $\langle H_B \rangle$ .

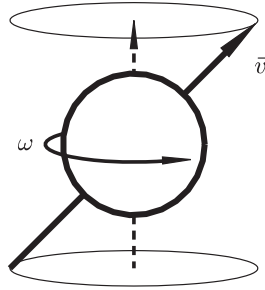


Рис. F.1. Среднее значение (обозначенное штриховой стрелкой) вектора  $\vec{v}$ , связанного с системой, вращающейся с угловой скоростью  $\omega$ , направлено вдоль оси вращения. Это — пример одного из базовых представлений, лежащих в основе теоремы Вигнера–Эккарта

матричный элемент между разными состояниями, поскольку коэффициенты Клебша–Гордона прямо дают правила отбора для матричных элементов, а для ненулевых членов они дают относительные знаки и величины для разных значений  $m$ ,  $m'$  и  $q$ .

## F.2. Неприводимые тензоры

В этом разделе мы обсуждаем примеры некоторых базовых декартовых тензоров и их свойства. Простейший способ получить тензор второго ранга  $T_{ij}$  состоит в том, чтобы построить так называемую *диад* из декартовых компонент двух векторов  $\vec{a}$  и  $\vec{b}$ :

$$T_{ij} = a_i b_j. \quad (\text{F.35})$$

Такой тензор имеет 9 компонент и преобразуется при пространственном вращении с помощью двух матриц поворота  $R_{ij}$  (одной для каждого вектора):

$$T_{mn} = R_{mi} R_{nj} T_{ij} = R_{mi} R_{nj} a_i b_j = \quad (\text{F.36})$$

$$= R_{mi} a_i R_{nj} b_j = a_m b_n, \quad (\text{F.37})$$

в отличие от вектора, который преобразуется при вращении с помощью одной матрицы поворота

$$a_m = R_{mi} a_i, \quad (\text{F.38})$$

и от скаляра, который инвариантен по отношению к вращениям. Вообще говоря, *ранг* тензора можно определить по числу матриц поворота, требуемых для преобразования объекта при пространственном вращении.

Однако оказывается, что диада, задаваемая соотношением (F.35), является *приводимой*, что означает, что она может быть разложена на объект, преобразующийся как скаляр, объект, преобразующийся как вектор, и объект, преобразующийся как тензор второго ранга. В частности, это может быть сделано следующим образом:

$$T_{ij} = a_i b_j = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{3} \delta_{ij} + \frac{a_i b_j + a_j b_i}{2} + \left( \frac{a_i b_j + a_j b_i}{2} - \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{3} \delta_{ij} \right). \quad (\text{F.39})$$

Первый член — скаляр (инвариантный при вращениях), второй член прямо связан с векторным произведением  $\vec{a} \times \vec{b}$  которое ведет себя при вращениях как вектор,

а последний член — симметричный тензор второго ранга с нулевым следом. Эти члены являются *неприводимыми тензорами*, поскольку, в отличие от диады (F.35), они не могут быть разложены на тензоры более низких рангов.

Заметим, что каждый из членов нашего разложения диады (F.35) имеет  $2\kappa + 1$  независимых компонент, так что

$$T_{ij}^{(0)} = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{3} \delta_{ij} \quad (\text{F.40})$$

имеет только одну независимую компоненту,

$$T_{ij}^{(1)} = \frac{(a_i b_j - a_j b_i)}{2} \quad (\text{F.41})$$

имеет три независимых компоненты, соответствующие компонентам  $\vec{a} \times \vec{b}$ , а

$$T_{ij}^{(2)} = \frac{(a_i b_j + a_j b_i)}{2} - \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{3} \delta_{ij} \quad (\text{F.42})$$

имеет пять независимых компонент, поскольку эта матрица симметрична и имеет нулевой след. В результате мы имеем  $1 + 3 + 5 = 9$  независимых компонент, и мы тем самым восстановили исходное число независимых компонент диады.

Мы, очевидно, можем поставить в соответствие независимым компонентам неприводимого декартова тензора второго ранга  $T_{ij}^{(2)}$   $2\kappa + 1$  компонент неприводимого сферического тензора  $T_q^2$ . Соотношение между компонентами декартова тензора  $T_{ij}^{(2)}$  и компонентами неприводимого тензора  $T_q^2$  имеет вид (см., например, [Varshlovich и др. (1988)]):

$$T_0^2 = T_{zz}^{(2)}, \quad (\text{F.43})$$

$$T_{\pm 1}^2 = \mp \sqrt{\frac{2}{3}} (T_{zx}^{(2)} \pm iT_{zy}^{(2)}), \quad (\text{F.44})$$

$$T_{\pm 2}^2 = \sqrt{\frac{1}{6}} (T_{xx}^{(2)} - T_{yy}^{(2)} \pm 2iT_{xy}^{(2)}). \quad (\text{F.45})$$

Разложение тензоров высших рангов оказывается значительно более сложным: например, из 27 независимых декартовых компонент тензора третьего ранга можно построить семь неприводимых тензоров (один — нулевого ранга, три — первого ранга, два — второго ранга и один третьего ранга)! К тому же такое разложение оказывается не однозначным.

Более детальное обсуждение тензоров и тензорных операторов можно найти в учебниках [Fano и Racah (1959)] и [Zare (1988)].

## Приложение G

### МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Матрица плотности — это инструмент, позволяющий описывать ансамбли <sup>1)</sup> квантовых систем (например, атомов), которые являются более общим случаем, чем ансамбли, которые могут быть описаны волновой функцией. В этом Приложении мы даем обзор основных свойств матрицы плотности и предлагаем несколько примеров ее применения. Выбранные примеры являются достаточно простыми, чтобы их можно было решить без применения матрицы плотности (минуту подумав), и приводятся просто для иллюстрации. Более детальное обсуждение этих вопросов можно найти в книгах [Stenholm (1984)] и [Blum (1986)].

#### G.1. Связь между матрицей плотности и волновой функцией

Ключевой момент матрицы плотности состоит в том, что она представляет более общее описание ансамбля частиц, чем волновая функция. Волновая функция способна описывать только ансамбль, который является полностью *когерентным* (или чистым), тогда как матрица плотности может также описывать ансамбли *частично когерентные* или *некогерентные*. Что это значит? Рассмотрим простой пример. Пусть мы имеем ансамбль атомов со спином 1/2. Рассмотрим только их внутренние состояния. Если все атомы находятся в одном и том же состоянии, например,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \quad (\text{G.1})$$

то мы говорим, что ансамбль находится в чистом состоянии. В этом случае волновая функция  $|\psi\rangle$  достаточна для описания поведения всего ансамбля.

Допустим теперь, что атомы испытывают столкновения <sup>2)</sup>, которые меняют случайным образом для каждого атома относительную фазу между компонентами «спин вверх» и «спин вниз», так что теперь, в определенный момент времени, мы имеем для  $i$ -го атома

$$|\psi^{(i)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + e^{i\phi_i} |-\rangle), \quad (\text{G.2})$$

где  $\phi_i$  — упомянутая выше случайная фаза.

---

<sup>1)</sup> Ансамбль может быть либо организован пространственно (например, атомы, помещенные в газовую ячейку), либо состоять из серии последовательных измерений, разнесенных во времени (в соответствующих обстоятельствах это может быть и одиночная квантовая система).

<sup>2)</sup> Процессы релаксации, такие, как столкновения и спонтанное излучение, стремятся разрушить когерентность, и оказывается, что такая *декогеренция* является одной из основных причин того, что квантово-механическое поведение так трудно наблюдать в макроскопических системах.

Теперь ансамбль находится в *смешанном состоянии*, которое можно описать с помощью волновой функции  $|\Psi\rangle$ , являющейся произведением индивидуальных волновых функций  $|\psi^{(i)}\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^N |\psi^{(i)}\rangle. \quad (\text{G.3})$$

Для атомного газа, состоящего из, например,  $10^{12}$  атомов, пытаться уследить за состояниями всех атомов — задача невыполнимая. Часто в этом и нет нужды, поскольку, во многих экспериментах, нас интересуют только средние свойства атомов ансамбля. (Заметим, однако, что в новомодной области квантовой информатики задача состоит в том, чтобы действительно проследить за многими или даже за *всеми* параметрами многочастичной волновой функции (подобной (G.3)).) Очевидно, требуется формализм, который позволит нам легко записывать такие усредненные свойства, в чем и состоит задача матрицы плотности.

В общем случае квантово-механическое состояние  $i$ -го атома  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  может быть записано как суперпозиция допустимых атомных состояний

$$|\psi^{(i)}(t)\rangle = \sum c_m^{(i)}(t) |m\rangle, \quad (\text{G.4})$$

где состояния  $|m\rangle$  образуют ортонормированный базис системы. Посмотрим теперь, каким образом вся информация, содержащаяся в волновой функции  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$ , также содержится в матрице плотности, элементы которой  $\rho_{mn}$  описываются выражением

$$\rho_{mn}^{(i)} = c_m^{(i)}(t) c_n^{(i)}(t)^*. \quad (\text{G.5})$$

В нашем примере внутренних состояний газа атомов со спином  $1/2$  выражение (G.4) сводится к выражению

$$|\psi^{(i)}(t)\rangle = c_+^{(i)}(t) |+\rangle + c_-^{(i)}(t) |-\rangle. \quad (\text{G.6})$$

Среднее значение физической наблюдаемой, например, проекции спина на ось квантования  $S_z$  описывается формулой

$$\langle S_z \rangle = \langle \psi^{(i)}(t) | S_z | \psi^{(i)}(t) \rangle, \quad (\text{G.7})$$

$$= (c_+^{(i)}(t)^* \ c_-^{(i)}(t)^*) \cdot \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_+^{(i)}(t) \\ c_-^{(i)}(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{G.8})$$

$$= \frac{\hbar}{2} |c_+^{(i)}(t)|^2 - \frac{\hbar}{2} |c_-^{(i)}(t)|^2. \quad (\text{G.9})$$

Мы можем также записать это среднее значение следующим образом:

$$\langle S_z \rangle = \sum_{m,n} \rho_{mn}^{(i)} \langle n | S_z | m \rangle. \quad (\text{G.10})$$

Мы можем выписать выражение (G.10) для случая атомов со спином  $1/2$

$$\langle S_z \rangle = \rho_{++}^{(i)} \langle + | S_z | + \rangle + \rho_{+-}^{(i)} \langle - | S_z | + \rangle + \rho_{-+}^{(i)} \langle + | S_z | - \rangle + \rho_{--}^{(i)} \langle - | S_z | - \rangle, \quad (\text{G.11})$$

и, поскольку матрица  $S_z$  диагональна, мы имеем

$$\langle S_z \rangle = \rho_{++}^{(i)} \langle + | S_z | + \rangle + \rho_{--}^{(i)} \langle - | S_z | - \rangle, \quad (\text{G.12})$$

$$= \frac{\hbar}{2} |c_+^{(i)}(t)|^2 - \frac{\hbar}{2} |c_-^{(i)}(t)|^2, \quad (\text{G.13})$$

что воспроизводит результат (G.9). Важный момент здесь состоит в том, что матрица (G.5) содержит всю информацию об атомной волновой функции. И еще более удобный способ записи среднего значения:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\text{Tr} [\rho^{(i)} \cdot S_z]}{\text{Tr} [\rho^{(i)}]}, \quad (\text{G.14})$$

где мы используем матричное представление оператора. Для случая спина 1/2, который мы рассматриваем,

$$\rho^{(i)} = \begin{pmatrix} \rho_{++}^{(i)} & \rho_{+-}^{(i)} \\ \rho_{-+}^{(i)} & \rho_{--}^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (\text{G.15})$$

Замечая, что  $\text{Tr} [\rho^{(i)}] = 1$  (поскольку след матрицы представляет собой полную населенность, которая в данном случае равна единице), мы можем легко убедиться, что соотношение (G.14) воспроизводит (G.9):

$$\langle S_z \rangle = \text{Tr} [\rho^{(i)} \cdot S_z], \quad (\text{G.16})$$

$$= \text{Tr} \left[ \begin{pmatrix} \rho_{++}^{(i)} & \rho_{+-}^{(i)} \\ \rho_{-+}^{(i)} & \rho_{--}^{(i)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.17})$$

$$= \frac{\hbar}{2} \rho_{++}^{(i)} - \frac{\hbar}{2} \rho_{--}^{(i)}. \quad (\text{G.18})$$

Этот результат может быть обобщен на случай любого оператора  $\Theta$ : для среднего значения имеем:

$$\langle \Theta \rangle = \text{Tr} [\rho^{(i)} \cdot \Theta]. \quad (\text{G.19})$$

## G.2. Матрица плотности, усредненная по ансамблю

Как можно догадаться, измеряемые свойства исходного (когерентного или некогерентного) ансамбля большого числа квантовых систем являются результатом усреднения по ансамблю математических ожиданий:

$$\overline{\langle S_z \rangle} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \psi^{(i)}(t) | S_z | \psi^{(i)}(t) \rangle = \quad (\text{G.20})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{m,n} \rho_{mn}^{(i)} \langle n | S_z | m \rangle, \quad (\text{G.21})$$

где  $\overline{\langle S_z \rangle}$  обозначает усреднение по всему ансамблю. Мы можем перестроить множители в сумме (G.21) следующим образом:

$$\overline{\langle S_z \rangle} = \sum_{m,n} \langle n | S_z | m \rangle \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_{mn}^{(i)} \right). \quad (\text{G.22})$$

Теперь имеет смысл определить

$$\rho_{mn} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_{mn}^{(i)} \quad (\text{G.23})$$

как элементы *усредненной по ансамблю матрицы плотности* (которую мы будем называть просто матрицей плотности). Так что мы можем написать выражение, аналогичное (G.14) для усреднения по ансамблю:

$$\overline{\langle S_z \rangle} = \frac{\text{Tr}[\rho \cdot S_z]}{\text{Tr}[\rho]}. \quad (\text{G.24})$$

Вероятность того, что атом ансамбля находится в состоянии  $|m\rangle$  определяется диагональными членами матрицы плотности  $\rho_{mm}$  (населенности); недиагональные элементы  $\rho_{mn}$  ( $m \neq n$ ) описывают степень когерентности между состояниями  $m$  и  $n$ .

Вернемся к нашему ансамблю спинов  $1/2$ . Рассмотрим два ансамбля атомов, один — полностью поляризован в состоянии  $(|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$ ,

$$\rho_{\text{pol}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{G.25})$$

и один — полностью деполяризован с равным содержанием состояний  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$  в смеси,

$$\rho_{\text{unpol}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{G.26})$$

где  $\rho_{\text{pol}}$  и  $\rho_{\text{unpol}}$  — нормированные ( $\text{Tr}[\rho] = 1$ ) матрицы плотности для соответствующих ансамблей. Заметим, что матрицы плотности  $\rho_{\text{unpol}}$  могут соответствовать только некогерентному ансамблю (или статистической смеси) атомов — ансамбль в чистом состоянии не может иметь такую матрицу плотности (поскольку в ней с необходимостью присутствуют недиагональные элементы)!

Оба ансамбля характеризуются отсутствием суммарной поляризации по оси  $z$ , в чем легко убедиться, используя соотношение (G.24):

$$\overline{\langle S_z \rangle}_{\text{pol}} = \text{Tr}[\rho_{\text{pol}} \cdot S_z], \quad (\text{G.27})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.28})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right] = 0, \quad (\text{G.29})$$

и

$$\overline{\langle S_z \rangle}_{\text{unpol}} = \text{Tr} [\rho_{\text{unpol}} \cdot S_z], \quad (\text{G.30})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.31})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = 0. \quad (\text{G.32})$$

Однако поляризованный образец имеет ненулевую (и фактически максимальную) проекцию спина на ось  $x$ :

$$\overline{\langle S_x \rangle}_{\text{pol}} = \text{Tr} [\rho_{\text{pol}} \cdot S_x], \quad (\text{G.33})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.34})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{G.35})$$

тогда как для неполяризованного ансамбля (образца), как мы знаем,  $\overline{\langle S_x \rangle}_{\text{unpol}} = 0$ :

$$\overline{\langle S_x \rangle}_{\text{unpol}} = \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.36})$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = 0. \quad (\text{G.37})$$

### Г.3. Временная эволюция матрицы плотности: уравнение Лиувилля

Следующий важный вопрос — как матрица плотности эволюционирует во времени. Из соотношений (G.25) и (G.23) мы видим, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{mn} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial c_m^{(i)}}{\partial t} c_n^{(i)*} + c_m^{(i)} \frac{\partial c_n^{(i)*}}{\partial t} \right). \quad (\text{G.38})$$

Из уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(i)}(t)\rangle = H |\psi^{(i)}(t)\rangle, \quad (\text{G.39})$$

где  $H$  — гамильтониан системы; используя разложение (G.4) мы имеем:

$$\sum_m \frac{\partial c_m^{(i)}}{\partial t} |m\rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_m c_m^{(i)}(t) H |m\rangle. \quad (\text{G.40})$$

Умножая обе стороны равенства (G.40) на  $\langle k|$  и принимая во внимание ортонормированность базисных состояний, мы приходим к выражению

$$\frac{\partial c_k^{(i)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \langle k|H|m\rangle c_m^{(i)}(t). \quad (\text{G.41})$$



Этот результат можно подставить в формулу (G.38), чтобы получить выражение для временной эволюции заданного элемента матрицы плотности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{mn} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{1}{i\hbar} \sum_k \langle m|H|k \rangle c_k^{(i)} c_n^{(i)*} - \frac{1}{i\hbar} \sum_k \langle k|H|n \rangle c_k^{(i)*} c_m^{(i)} \right), \quad (\text{G.42})$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \sum_k (\langle m|H|k \rangle \rho_{kn} - \rho_{mk} \langle k|H|n \rangle). \quad (\text{G.43})$$

Приведенное выражение (G.43) может быть выражено через матрицы, что дает уравнение

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho], \quad (\text{G.44})$$

известное как *уравнение Лиувилля*. Это — важное уравнение, управляющее временной эволюцией матрицы плотности. Заметим, что до сих пор мы не включали в задачу никаких процессов релаксации.

Вернемся теперь к ансамблю атомов со спином 1/2. Пусть атомы помещены в магнитное поле  $\vec{B} = B_0 \hat{x}$ , направленное по оси  $x$ . Гамильтониан этой системы имеет вид

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g\mu_0 B_0 S_x, \quad (\text{G.45})$$

$$= \frac{g\mu_0 B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{G.46})$$

Подставляя этот гамильтониан в уравнение Лиувилля, мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{g\mu_0 B_0 \hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{g\mu_0 B_0}{2i} \left[ \begin{pmatrix} \rho_{-+} & \rho_{--} \\ \rho_{++} & \rho_{+-} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{+-} & \rho_{++} \\ \rho_{--} & \rho_{-+} \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{G.47}) \end{aligned}$$

В результате мы получаем систему четырех связанных дифференциальных уравнений для четырех элементов матрицы плотности.

Теперь проанализируем поведение этой системы для различных начальных условий. Мы знаем, что неполяризованный ансамбль не должен меняться под действием магнитного поля (конечно, пренебрегая тепловым перераспределением населенностей подуровней, обусловленным какими-либо механизмами релаксации). В этом можно убедиться, используя уравнение Лиувилля и  $\rho_{\text{unpol}}$  (соотношение (G.26)) в качестве начального условия, откуда мы находим, что  $\partial\rho/\partial t$  при  $t = 0$  обращается в ноль. Поскольку изначально ни населенности, ни когерентности не меняются, мы можем экстраполируя, сказать, что они постоянны во времени.

Рассмотрим теперь ансамбль атомов, первоначально поляризованных вдоль  $-\hat{z}$ . Тогда для начальной матрицы плотности мы имеем:

$$\rho(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{G.48})$$

Когда этот ансамбль атомов внезапно подвергается действию магнитного поля, мы ожидаем, что атомы начнут прецессировать с ларморовой частотой  $\Omega_L = g\mu_0 B_0$

вокруг оси  $x$ . Рассмотрим только малые времена  $\delta t \ll \Omega_L^{-1}$ , на которых мы ожидаем, что населенность состояния  $|+\rangle$  будет возрастать квадратично со временем (см., например, задачи 2.6 и 3.1). Временная производная от  $\rho_{++}$  пропорциональна разности когерентностей, так что сначала найдем временные зависимости когерентностей:

$$\left. \frac{\partial \rho_{+-}}{\partial t} \right|_{t=0} = \frac{ig\mu_0 B_0}{2} [\rho_{++}(0) - \rho_{--}(0)] = -\frac{ig\mu_0 B_0}{2}, \quad (\text{G.49})$$

$$\left. \frac{\partial \rho_{-+}}{\partial t} \right|_{t=0} = \frac{ig\mu_0 B_0}{2} [\rho_{--}(0) - \rho_{++}(0)] = +\frac{ig\mu_0 B_0}{2}. \quad (\text{G.50})$$

Используя выражения (G.49) и (G.50), мы действительно получаем

$$\rho_{++}(\delta t) \approx \frac{g^2 \mu_0^2 B_0^2}{4} (\delta t)^2. \quad (\text{G.51})$$

И, наконец, отметим, что релаксационные процессы могут быть включены в уравнение Лиувилля (также известное как уравнение движения) различными способами в зависимости от конкретной природы механизма релаксации (см., например, [Stenholm (1984)]). Если релаксация может быть описана простой экспоненциальной динамикой населенностей (например, благодаря спонтанному излучению на иные уровни), то в этом случае можно использовать диагональную *матрицу релаксации*  $\Gamma$

$$\langle m|\Gamma|n\rangle = \gamma_n \delta_{nm}, \quad (\text{G.52})$$

где  $\gamma_n$  — соответствующая скорость релаксации населенности данного уровня, а  $\delta_{mn}$  — символ Кронекера. Тогда уравнение движения может быть записано в виде

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] - \frac{1}{2} (\Gamma\rho + \rho\Gamma). \quad (\text{G.53})$$

## G.4. Моменты атомной поляризации

Матрица плотности ансамбля атомов в состоянии с угловым моментом  $F$  имеет  $(2F+1) \times (2F+1)$  компонент  $\rho_{M,M'}$ , где  $M$  и  $M'$  относятся к зеемановским подуровням. Матрица плотности  $\rho$ , фактически, может рассматриваться как тензор, и часто полезно работать с неприводимыми компонентами  $\rho$  (см. Приложение F). Можно представить  $\rho$  в следующем виде (см., например, [Omont (1877)] и [Varshovich и др. (1988)]):

$$\rho = \sum_{\kappa=0}^{2F} \sum_{q=-\kappa}^{\kappa} \rho_q^{(\kappa)} T_q^{(\kappa)}, \quad (\text{G.54})$$

где  $T_q^{(\kappa)}$  — компоненты неприводимых тензоров, представляемых матрицами  $(2F+1) \times (2F+1)$ , а коэффициенты  $\rho_q^{(\kappa)}$  с  $\kappa = 0, \dots, 2F$  и  $q = -\kappa, \dots, \kappa$  называют *мультиполями состояний*. Величины  $\rho_q^{(\kappa)}$  и  $\rho_{M,M'}$  связаны между собой соотношением

$$\rho_q^{(\kappa)} = \sum_{M,M'=-F}^F (-1)^{F-M'} \langle F, M, F, -M' | \kappa, q \rangle \rho_{M,M'}. \quad (\text{G.55})$$

Если коэффициенты  $\rho_q^{(\kappa)}$  известны, то матрица плотности  $\rho_{M,M'}$  может быть восстановлена с помощью преобразования, обратного преобразованию (G.55):

$$\rho_{M,M'} = \sum_{\kappa,q} (-1)^{F-M'} \langle F, M, F, -M' | \kappa, q \rangle \rho_q^{(\kappa)}. \quad (\text{G.56})$$

Представление операторов  $T_q^{(\kappa)}$  в базисе  $M, M'$  может быть получено с помощью соотношения (G.56). Например, для  $M = 1$ , подставляя  $\rho_q^{(\kappa)} = \delta_{\kappa,0} \delta_{q,0}$ , мы получаем

$$T_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{G.57})$$

В случае  $\rho_q^{(\kappa)} = \delta_{\kappa,1} \delta_{q,0}$ , получаем

$$T_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{G.58})$$

а для  $\rho_q^{(\kappa)} = \delta_{\kappa,2} \delta_{q,0}$  имеем

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{G.59})$$

Для различных мультиполей состояний используется следующая терминология:  $\rho^{(0)}$  — монополярный момент (равный населенности, деленной на  $\sqrt{2F+1}$ ),  $\rho^{(1)}$  — векторный момент или *ориентация*,  $\rho^{(2)}$  — квадрупольный момент или *выстраивание*,  $\rho^{(3)}$  — октупольный момент и  $\rho^{(4)}$  — гексадекаполярный момент<sup>1)</sup>. Каждый из моментов  $\rho^{(\kappa)}$  имеет  $2\kappa + 1$  компонент.

Термин *поляризация* используется в общем случае ансамбля, имеющего любой момент с  $\kappa > 0$ . Когда зеемановские подуровни не заселены равномерно, то  $\rho_0^{(\kappa)} \neq 0$  для некоторых  $\kappa > 0$ , и среда обладает так называемой *продольной поляризацией*. Когда между подуровнями существует когерентность, то  $\rho_q^{(\kappa)} \neq 0$  для некоторых  $q \neq 0$  и говорят, что среда имеет *поперечную поляризацию*. Если ось  $z$  является осью квантования, то продольная ориентация  $\rho_0^{(1)}$  и продольное выстраивание  $\rho_0^{(2)}$  определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \rho_0^{(1)} &\propto \langle F_z \rangle, \\ \rho_0^{(2)} &\propto \langle 3F_z^2 - F^2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{G.60})$$

Как работают эти формулы для случая  $F = 1$  можно непосредственно проследить, пользуясь соотношениями (G.57) и (G.58).

Отметим также, что оптическая накачка циркулярно поляризованным светом (при отсутствии внешних полей), в общем случае, создает мультиполи всех порядков

<sup>1)</sup> В литературе встречаются другие определения терминов «ориентация» и «выстраивание». Например Заре [Zare (1988)] отождествляет выстраивание с любым четным моментом атомной поляризации (квадрупольный, гексадекаполярный и т. д.), а ориентацию — с нечетными моментами (дипольный, октупольный и т. д.).

( $\kappa \leq 2F$ ), тогда как накачка линейно поляризованным светом создает только мультиполи четных порядков. Этот последний факт имеет симметричную природу, что видно особенно ясно, когда ось квантования совпадает с направлением поляризации света: очевидно, что в этом случае линейно поляризованный свет не создает выделенного направления в пространстве, а создает лишь выделенную ось.

Чтобы проиллюстрировать эти соображения и приобрести некоторый опыт обращения с формализмом поляризационных моментов, рассмотрим матрицы плотности, описывающие ансамбль атомов с  $F = 3/2$  в основном состоянии и подвергаемых оптической накачке светом, более или менее резонансным переходу в возбужденное состояние с  $F = 1/2$ . Мы будем считать, что возбужденное состояние, в основном, распадается на другие состояния (открытая система). Именно такая ситуация рассматривается в задаче 3.10, где было показано, что при накачке  $\sigma_+$  светом равновесная матрица плотности имеет вид:

$$\rho(\sigma_+) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{G.61})$$

а для света, линейно поляризованного вдоль оси  $x$ , мы получаем

$$\rho(x) = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 & 3 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{G.62})$$

Здесь матрицы плотности нормированы таким образом, что полная населенность равна единице.

Теперь рассчитаем мультиполи состояний для этих ансамблей. Формулу (G.55) можно переписать следующим образом:

$$\rho_q^{(\kappa)} = \text{Tr} [\rho \cdot T(\kappa, q)], \quad (\text{G.63})$$

где  $T(\kappa, q)$  — матрица  $(2F + 1) \times (2F + 1)$  (в данном случае  $4 \times 4$ ), элементы которой описываются выражением

$$T_{M, M'}(\kappa, q) = (-1)^{F-M'} \langle F, M, F, -M' | \kappa, q \rangle. \quad (\text{G.64})$$

Мы, например, можем вычислить для обоих ансамблей монополярный момент:

$$\rho_0^{(0)}(\sigma_+) = \text{Tr} [\rho(\sigma_+) \cdot T(0, 0)] = \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2}, \quad (\text{G.65})$$

что согласуется с тем фактом, что монополярный момент — это есть населенность, деленная на  $\sqrt{2F+1}$ . Для накачки светом с  $x$ -поляризацией

$$\rho_0^{(0)}(x) = \text{Tr} [\rho(x) \cdot T(0, 0)] =$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 & 3 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2}. \quad (\text{G.66})$$

Таблица G.1

Значения различных мультипольных моментов основного состояния с  $F = 3/2$ , которое подвергалось оптической накачке либо  $\sigma_+$ , либо  $x$ -поляризованным светом, резонансным с переходом  $F = 3/2 \rightarrow F' = 1/2$ . Наибольший мультипольный момент этой системы соответствует  $\kappa = 2F = 3$ . Заметим, что в этом частном случае оптическая накачка циркулярно поляризованным светом не создает выстраивания, что не всегда так для произвольного перехода

$F \rightarrow F'$

	Мультиполь	$\sigma_+$	$x$
Монополь	$\rho_0^{(0)}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Диполь (ориентация)	$\rho_1^{(1)}$	0	0
	$\rho_0^{(1)}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	0
	$\rho_{-1}^{(1)}$	0	0
Квадруполь (выстраивание)	$\rho_2^{(2)}$	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$
	$\rho_1^{(2)}$	0	0
	$\rho_0^{(2)}$	0	$-\frac{1}{4}$
	$\rho_{-1}^{(2)}$	0	0
	$\rho_{-2}^{(2)}$	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}$
Оккуполь	$\rho_3^{(3)}$	0	0
	$\rho_2^{(3)}$	0	0
	$\rho_1^{(3)}$	0	0
	$\rho_0^{(3)}$	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	0
	$\rho_{-1}^{(3)}$	0	0
	$\rho_{-2}^{(3)}$	0	0
	$\rho_{-3}^{(3)}$	0	0

Теперь обратимся к ориентации. Найдем продольную ориентацию  $\rho_0^{(1)}$  для обоих ансамблей,

$$\begin{aligned} \rho_0^{(1)}(\sigma_+) &= \text{Tr} [\rho(\sigma_+) \cdot T(1, 0)] = \\ &= \text{Tr} \left[ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{3}{2\sqrt{5}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2\sqrt{5}} \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{5}}. \quad (\text{G.67}) \end{aligned}$$

Так что, как и ожидалось, мы находим, что ансамбль, который подвергался оптической накачке циркулярно поляризованным светом оказывается ориентированным вдоль оси  $z$ , тогда как

$$\begin{aligned} \rho_0^{(1)}(x) &= \text{Tr} [\rho(x) \cdot T(1, 0)] = \\ &= \text{Tr} \left[ \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 & 3 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{3}{2\sqrt{5}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2\sqrt{5}} \end{pmatrix} \right] = 0, \quad (\text{G.68}) \end{aligned}$$

так что, как ясно из симметричных соображений, ансамбль, оптическая накачка которого производится  $x$ -поляризованным светом, не ориентируется вдоль оси  $z$ . Аналогичные расчеты можно провести для всех остальных возможных моментов поляризации; результаты приведены в табл. G.1.

## Приложение Н

# ЭЛЕМЕНТЫ ФЕЙНМАНОВСКОЙ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ

В этом Приложении мы сделаем краткий обзор некоторых базовых элементов диаграммной техники расчета амплитуд и вероятностей переходов в рамках теории возмущений с временной зависимостью. Диаграммы Фейнмана обеспечивают очень простой, удобный и наглядный способ понимания процесса и, кроме того, позволяют записать математическое выражение для амплитуды перехода (см. задачи 3.16, 3.17 и 4.2). Более подробное и строгое обсуждение диаграммной техники можно найти, например, в курсах [Delone и Krainov (1985)] и [Cohen-Tannoudji (1992)]. Использование диаграмм для расчета линейных и нелинейных восприимчивостей  $\chi^{(n)}$  рассматривается в [Delone и Krainov (1985)].

Исходным пунктом нашего обсуждения будет служить Золотое правило Ферми:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho_f(E), \quad (\text{Н.1})$$

которое связывает скорость перехода  $W_{fi}$  из состояния  $i$  в состояние  $f$  с матричным элементом возмущения  $V_{fi}$ . Здесь  $\rho_f(E)$  — плотность конечных состояний в пространстве энергии. Диаграммы представляют различные вклады в амплитуду  $V_{fi}$ .

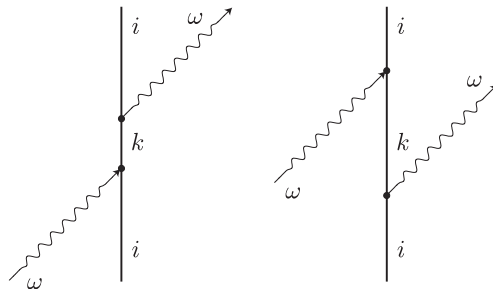


Рис. Н.1. Две фейнмановские диаграммы, представляющие упругое рассеяние фотона

На фейнмановской диаграмме (рис. Н.1), часто используемой в атомной и молекулярной физике и оптике, эволюция атомных состояний представляется сплошными вертикальными линиями и считается, что время растет снизу вверх<sup>1)</sup>. Фотоны обозначаются волнистыми линиями, направленными под углом к линии атомного состояния (ребро) диаграммы. Точка пересечения линии фотона и ребра называется вершиной. Линия фотона либо заканчивается в *вершине* (поглощение фотона), либо начинается в вершине (испускание фотона).

<sup>1)</sup> Заметим, что существует множество способов изображения фейнмановских диаграмм с различными направлениями оси времени, различной формой линий и т. д.

Амплитуда, соответствующая одиночной диаграмме, строится с использованием нижеследующих правил, которые определяются теорией зависящих от времени возмущений и квантово-механическим описанием электромагнитного поля.

— Начиная с низа ребра и двигаясь вверх, для каждой вершины записываем соответствующую силу взаимодействия в виде множителя. Например, используя электрическое дипольное приближение для каждого процесса поглощения/испускания, множитель взаимодействия равен  $d_{mn}$ , т. е. дипольному матричному элементу между атомными состояниями над и под вершиной.

— Каждый отрезок между двумя вершинами представляется пропагатором (каждый пропагатор входит в выражение как множитель)

$$\frac{1}{E_m + \sum \hbar\omega_m - (E_i + \sum \hbar\omega_i)}, \quad (\text{H.2})$$

где  $E_m$  и  $E_i$  представляют энергии  $m$ -го и начального состояний, а суммирование производится по энергиям фотонов, присутствующим в этом состоянии. Когда рассматриваемый процесс является почти резонансным, т. е. когда пропагатор имеет почти нулевой знаменатель, нужно учесть ширины уровней путем замены  $E_j$  на  $E_j - i\Gamma_j/2$ .

— Каждая входящая и выходящая фотонная линия, соответствующая фотону с частотой  $\omega_\alpha$  и поляризацией  $\vec{\epsilon}_\alpha$ , представляется мультипликативным множителем

$$-i\sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha} \cdot \vec{\epsilon}_\alpha \text{ — входящий фотон,} \quad (\text{H.3})$$

$$i\sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha} \cdot \vec{\epsilon}_\alpha^* \text{ — уходящий фотон} \quad (\text{H.4})$$

соответственно. Эти величины нормируются на единичный объем, так что ни здесь, ни в плотности состояний не нужно явно включать объем.

— Когда имеется  $n_{k\varepsilon}$  фотонов (в момент времени, соответствующий нижней границе диаграммы) в моде, соответствующей входящим фотонам, множитель (H.3) должен быть помножен на  $\sqrt{n_{k\varepsilon}}$ .

— Когда имеется  $n_{k\varepsilon}$  фотонов (в момент времени, соответствующий нижней границе диаграммы) в моде, соответствующей уходящему фотону, множитель (H.4) должен быть помножен на  $\sqrt{n_{k\varepsilon} + 1}$ .

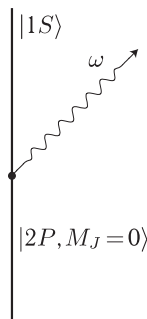


Рис. Н.2. Диаграмма Фейнмана, описывающая излучательное затухание возбужденного атомного состояния



В пределе большого числа фотонов в моде, когда поле фотонов можно описывать классически, фотонный множитель пропорционален амплитуде электрического поля.

Для того чтобы найти амплитуду  $V_{fi}$ , нужно просуммировать амплитуды, соответствующие всем возможным различным диаграммам для данного процесса.

В качестве простого примера, иллюстрирующего использование фейнмановских диаграмм, рассмотрим спонтанный распад состояния  $|2P, M_J = 0\rangle$  атома водорода (рис. Н.2) (все подуровни, разумеется, релаксируют с одной скоростью).

Следуя описанным выше правилам, мы находим, что для направления поляризации света, составляющего угол  $\theta$  с осью  $z$ ,

$$V = i\sqrt{2\pi\hbar\omega} \vec{d} \cdot \vec{\varepsilon}^* = id_z \cos(\theta) \sqrt{2\pi\omega} = \frac{|\langle J||d||J'\rangle|}{\sqrt{3}} \sqrt{2\pi\omega} \cos(\theta). \quad (\text{H.5})$$

Подставляя этот результат в (Н.1), и используя для плотности конечных состояний (принимая во внимание, в соответствии с законом сохранения энергии, что  $\hbar\omega = E_{2P}$ ) выражение (см. задачу 3.3)

$$\rho_f = \frac{2\omega^2}{(2\pi)^2 \hbar^2 c^3}, \quad (\text{H.6})$$

мы находим радиационную ширину

$$\Gamma = W_{fi} = \frac{2}{3} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\langle J||d||J'\rangle|^2}{3} 2\pi\omega \frac{2\omega^2}{(2\pi)^2 c^3} = \frac{4|\langle J||d||J'\rangle|^2 \omega^3}{9\hbar c^3}. \quad (\text{H.7})$$

Здесь множитель  $2/3$  возникает в результате интегрирования  $\cos\theta$  по телесному углу. Приведенную формулу (Н.7) можно сопоставить с формулой (3.115) из задачи 3.3, которая была выведена без использования техники фейнмановских диаграмм.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров Е. Б., Веденин В. Д. и Кулясов В. Н., (1984). Уширение и сдвиг резонансных линий тулия гелием. *Опт. и спектр.*, **56** (4), 596–600.
2. Барков Л. М. и Золоторев М. С. (1978). Наблюдение нарушения четности на атомных переходах. *Письма в ЖЭТФ*, **27**, 379–83.
3. Барков Л. М., Золоторев М. С. и Мелик-Пашаев Д. А. (1989). Исследование запрещенных переходов  $4f^6 s^2 {}^7F \rightarrow 4f^6 6s^2 {}^5D$  одноатомного самария. *Опт. и спектр.*, **66** (3), 495–500.
4. Веденин В. Д., Кулясов В. Н., Курбатов А. Л., Родин Н. В. и Шубин М. В. (1986). Запрещенная линия 12,76-мкм в спектре поглощения нейтрального самария. *Опт. и спектр.*, **60** (2), 239–43.
5. Макаров А. А. (1983). Возбуждение атомов нерезонансными световыми импульсами. *ЖЭТФ*, **85**, 1192–1202.
6. Сушков О. П., Фламбаум В. В. и Хриплович И. Б. (1984). О возможности исследования Р- и Т-нечетных ядерных сил в атомных и молекулярных экспериментах. *ЖЭТФ*, **87** (5), 1521.
7. Тер-Микаэлян М. И. (1997). Простые атомные системы в резонансных лазерных полях. *УФН*, **167** (12), 1249.
8. Ageron, P., Mampe, W., Golub, R., and Pendelbury, J. M. (1978). Measurement of the ultra cold neutron production rate in an external liquid helium source. *Physics Letters A*, **66** (6), 469–71.
9. Alexandrov, E. B., Balabas, M. V., Pasgalev, A. S., Vershovskii, A. K., and Yakobson, N. N., (1996). Double-resonance atomic magnetometers: from gas discharge to laser pumping. *Laser Physics*, **6** (2), 244–51.
10. Alexandrov, E. B., Chaika, M. P., and Khvostenko, G. I. (1993). *Interference of atomic states*. Springer, New York; Александров Е. Б., Хвостенко Г. И. и Чайка М. П. *Интерференция атомных состояний*. М.: Наука, 1991.
11. Alexandrov, E. B., Balabas, M. V., Budker, D., English, D. S., Kimball, D. F., Li, C.-H., and Yashchuk, V. V. (2002). Light-induced desorption of alkali atoms from paraffin coating. *Physical Review A*, **66** (4), 042903.
12. Allen, L. and Eberly, J. H. (1987). *Optical resonance and two-level atoms*. Dover, New York.
13. Amoretti, M., *et al.* [ATHENA Collaboration], (2002). Production and detection of cold antihydrogen atoms. *Nature*, **419**, 456–9.
14. Anderson, D. Z., Frisch, J. C., and Masser, C. S. (1984). Mirror reflectometer based on optical cavity decay time. *Applied Optics*, **23**, (8), 1238–45.
15. Anderson, L. W., Pipkin, F. M., and Baird, J. C. (1960). Hyperfine structure of hydrogen, deuterium, and tritium. *Physical Review*, **120** (4), 1279–89.
16. Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E., and Cornell E. A. (1995). Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, **269** (5221), 198–201.
17. Andreev, A. V., Ilinski, Yu. A., and Emelyanov, V. I. (1993). *Cooperative effects in optics: superradiance and phase transitions*. Institute of Physics Publishing, Bristol, Philadelphia.
18. Arfken, G. B. (1985). *Mathematical methods for physicists*. Academic Press, Orlando.

19. Aspect, A., Arimondo, E., Kaiser, R., Vansteenkiste, N., and Cohen-Tannoudji, C. (1988) Laser cooling below the one-photon recoil energy by velocity-selective coherent population trapping. *Physical Review Letters*, **61** (7), 826–9.
20. Audoin, C. and Guinot, B. (2001). *The measurement of time: time, frequency, and the atomic clock*. Cambridge University Press, Cambridge.
21. Auzinsh, M. and Ferber, R. (1995). *Optical polarization of molecules*. Cambridge University Press, Cambridge.
22. Baierlein, R. (1999). *Thermal physics*. Cambridge University Press, Cambridge.
23. Barenco, A., Deutsch, D., Ekert, A., and Jozsa, R. (1995). Conditional quantum dynamics and logic gates. *Physical Review Letters*, **74** (20), 4083–6.
24. Batygin, V. V., ter Haar, D., and Toptygin, I. N. (1978). *Problems in electrodynamics*. Academic Press, London.
25. Baur, G., Boero, G., Brauksiepe, S., Buzzo, A., Eylich, W., Geyer, R., Grzonka, D., Hauffe, J., Kilian, K., LoVetere, M., Macri, M., Moosburger, M., Nellen, R., Oelert, W., Passaggio, S., Pozzo, A., Rohrich, K., Sachs, K., Schepers, G., Sefzick, T., Simon, R. S., Stratmann, R., Stinzing, F., and Wolke, M. (1996). Production of antihydrogen. *Physics Letters B*, **368** (3), 251–8.
26. Bazalgette, G., Bachner, M., Champenois, C., Trenec, G., and Vigue, J. (1999). Saturation spectroscopy of the A-X transition of the ICl molecule. *European Physical Journal D*, **6**, 193–200.
27. Bennett, S. C. and Wieman, C. E. (1999). Measurement of the 6S to 7S transition polarizability in atomic cesium and an improved test of the standard model. *Physical Review Letters*, **82** (12), 2484–2487.
28. Berry, M. V. (1984). Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, **392**, (1802), 45–57.
29. Bethe, H. A. and Salpeter, E. E. (1977). *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*. Plenum, New York.
30. Beverini, N., Lagomarsino, V., Manuzio, G., Scuri, F., Testera, G., and Torelli, G. (1988). Stochastic cooling in Penning traps. *Physical Review A*, **38** (1), 107–14.
31. Birich, G. N., Bogdanov, Yu. V., Kanorskii, S. I., Sobelman, I. I., Sorokin, V. N., Struk, I. I., and Yukov, E. A. (1994). Precision laser spectropolarimetry. *Journal of Russian Laser Research*, **15** (6), 455–76.
32. Birkett, B. B., Briand, J. P., Charles, P., Dietrich, D. D., Finlayson, K., Indelicato, P., Liesen, D., Marrus, R., and Simionovici, A. (1993). Hyperfine quenching and measurement of the  $2^3P_0 - 3P_1$  fine-structure splitting in helium-like silver. *Physical Review A*, **47** (4), R2454–8.
33. Blanford, G., Christian, D. C., Gollwitzer, K., Mandelkern, M., Munger, C. T., Schultz, J., and Zioulas, G. (1998). Observation of atomic antihydrogen. *Physical Review Letters*, **80** (14), 3037–40.
34. Blum, K. (1996). *Density matrix theory and applications*. Plenum Press, New York.
35. Born, M. and Wolf, E. (1980). *Principles of optics*. Pergamon Press, New York.
36. Bouchiat, C. (1989). Berry phases for quadratic spin Hamiltonians taken from atomic and solid state physics: examples of Abelian gauge fields not connected to physical particles. *Journal de Physique I*, **50** (9), 1041–5.
37. Bouchiat, M. A. (1963). Relaxation magnétique d'atomes de rubidium sur des parois paraffinées. *Journal de Physique*, **24**, 379–90.
38. Bouchiat, M. A. and Bouchiat, C. (1974). Weak neutral currents in atomic physics. *Physics Letters*, **48B** (2), 111–14.
39. Bouchiat, M. A. and Bouchiat, C. (1975). Parity violation induced by weak neutral currents in atomic physics II. *Journal de Physique*, **36** (6), 493.

40. Bouchiat, M. A. and Bouchiat, C. (1997). Parity violation in atoms. *Reports on Progress in Physics*, **60** (11), 1351–96.
41. Bouchiat, M. A., Guéna, J., Hunter, L., and Pottier, L. (1982). Observation of a parity violation in cesium. *Physics Letters B*, **117B** (5), 358–64.
42. Bowers, C. J., Budker, D., Freedman, S. J., Gwinner, G., Stalnaker, J. E., and DeMille, D. (1999). Experimental investigation of the  $6s^2\ ^1S_0 \rightarrow 5d6s\ ^3D_{1,2}$  forbidden transitions in atomic ytterbium. *Physical Review A*, **59** (5), 3513–3526.
43. Boyd, R. W. (2003). *Nonlinear Optics*. Academic Press, San Diego.
44. Bradley, C. C., Sackett, C. A., Tollett, J. J., and Hulet, R. G. (1995). Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, **75** (9), 1687–90.
45. Brand, H., Nottbeck, B., Schulz, H. H., and Steudel, A. (1978). Laser-atomic-beam spectroscopy in the samarium I spectrum. *Journal of Physics B*, **11** (4), L99–L103.
46. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (1989). *Introduction to quantum mechanics*. Longman, Essex.
47. Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2003). *Physics of atoms and molecules*. Pearson Education Ltd., Essex.
48. Brown, L. S. and Gabrielse, G. (1986). Geonium theory: physics of a single electron or ion in a Penning trap. *Reviews of Modern Physics*, **58** (1), 233–313.
49. Bruun, G. M. and Burnett, K. (1998). Interacting Fermi gas in a harmonic trap. *Physical Review A*, **58** (3), 2427–34.
50. Budker, D. (1998a). Electrons in a shell. *American Journal of Physics*, **66** (7), 572–3.
51. Budker, D. (1998b). Parity nonconservation in atoms. In *Physics Beyond the Standard Model* (eds. P. Herczeg, C. M. Hoffman, and H. V. Klapdor-Kleingrothaus), pp. 418–41. World Scientific, Singapore.
52. Budker, D., DeMille, D., Commins, E. D., and Zolotarev, M. S. (1994). Experimental investigation of excited states in atomic dysprosium. *Physical Review A*, **50** (1), 132–43.
53. Budker, D., Gawlik, W., Kimball, D. F., Rochester, S. M., Yashchuk, V. V., and Weis, A. (2002). Resonant nonlinear magneto-optical effects in atoms. *Reviews of Modern Physics*, **74** (4), 1153–1201.
54. Budker, D., Hollberg, L., Kitching, J., Robinson, H. G., and Yashchuk, V. (2003). Investigation of microwave transitions in antirelaxation-coated cells. *Physical Review A*, **71**, 012903.
55. Budker, D., Kimball, D. F., Rochester, S. M., and Urban, J. T. (2003). Alignment-to-orientation conversion and nuclear quadrupole resonance. *Chemical Physics Letters*, **378** (3–4), 440–8.
56. Cates, G. D., Schaefer, S. R., and Happer, W. (1988). Relaxation of spins due to field inhomogeneities in gaseous samples at low magnetic fields and low pressures. *Physical Review A*, **37** (8), 2877.
57. Caves, C. M. (1980) Quantum-mechanical radiation-pressure fluctuations in an interferometer. *Physical Review Letters*, **45** (2), 75–9.
58. Caves, C. M. (1981). Quantum-mechanical noise in an interferometer. *Physical Review D*, **23** (8), 1693–708.
59. Chan, H. W., Black, A. T., and Vuletić, V. (2003). Observation of collective-emission-induced cooling of atoms in an optical cavity. *Physical Review Letters*, **90** (6), 063003.
60. Chu, S. (1998). Nobel lecture: The manipulation of neutral particles. *Reviews of Modern Physics*, **70** (3), 685–706.
61. Cohen-Tannoudji, C. (1998). Nobel lecture: Manipulating atoms with photons. *Reviews of Modern Physics*, **70** (3), 707–19.

62. Cohen-Tannoudji, C.N. and Phillips, W.D. (1990). New mechanisms for laser cooling. *Physics Today*, **43** (10), 33–40.
63. Cohen-Tannoudji, C., Dupont-Roc, J., and Grynberg, G. (1992). *Atom-photon interactions: basic processes and applications*. Wiley, New York.
64. Commins, E. D. (1991). Berry's geometric phase and motional fields. *American Journal of Physics*, **59** (12), 1077–80.
65. Commins, E. D., Jackson, J. D., and DeMille, D. P. (2007). The electric dipole moment of the electron: An intuitive explanation for the evasion of Schiff's theorem. *American Journal of Physics*, **75** (6), 532–6.
66. Condon, E. U. and Shortley, G. H. (1970). *The theory of atomic spectra*. Cambridge University Press, London.
67. Conti, R., Bucksbaum, P., Chu, S., Commins, E., and Hunter, L. (1979). Preliminary observation of parity nonconservation in atomic thallium. *Physical Review Letters*, **42** (6), 343–6.
68. Cornell, E. A. and Wieman, C. E. (2002). Nobel lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. *Reviews of Modern Physics*, **74** (3), 875–93.
69. Corney, A. (1988). *Atomic and laser spectroscopy*. Clarendon Press, Oxford.
70. Cundiff, S. T., Ye, J., and Hall, J. L. (2001). Optical frequency synthesis based on mode-locked lasers. *Review of Scientific Instruments*, **72** (10), 3749–71.
71. Davis, K. B., Mewes, M.-O., Andrews, M. R., van Druten, N. J., Durfee, D. S., Kurn, D. M., and Ketterle, W. (1995). Bose-Einstein Condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, **75** (22), 3969–73.
72. Dehmelt, H. (1989). Less is more: experiments with an individual atomic particle at rest in free space. *American Journal of Physics*, **58** (1), 17–27.
73. Delone, N. B. and Krainov, V. P. (1985). *Atoms in strong light fields*. Springer-Verlag, Berlin.
74. Delone, N. B. and Krainov, V. P. (1988). *Fundamentals of nonlinear optics of atomic gases*. Wiley, New York.
75. DeMarco, B. and Jin, D. S. (1999). Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas. *Science*, **285** (5434), 1703–6.
76. DeMarco, B., Papp, S. B., and Jin, D. S. (2001). Pauli blocking of collisions in a quantum degenerate atomic fermi gas. *Physical Review Letters*, **86** (24), 5409–12.
77. DeMille, D. (1995). Parity nonconservation in the  $6s^2\ ^1S_0 \rightarrow 6s5d\ ^3D_1$  transition in atomic ytterbium. *Physical Review Letters*, **74** (21), 4165–8.
78. DeMille, D. (2002). Quantum computation with trapped polar molecules. *Physical Review Letters*, **88** (6), 067901.
79. Demtröder, W. (1996). *Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation*. Springer, Berlin.
80. DePue, M. T., McCormick, C., Winoto, S. L., Oliver, S., and Weiss, D. S. (1999). Unity occupation of sites in a 3D optical lattice. *Physical Review Letters*, **82** (11), 2262–5.
81. Dicke, R. H. (1953). The effect of collisions upon the doppler width of spectral lines. *Physical Review*, **89** (2), 472–3.
82. Dicke, R. H. (1954). Coherence in spontaneous radiation process. *Physical Review*, **93** (1), 99–110.
83. Dos Santos, F. P., Leonard, J., Wang, J. M., Barrelet, C. J., Perales, F., Rasel, E., Unnikrishnan, C. S., Leduc, M., and Cohen-Tannoudji, C. (2001). Bose-Einstein condensation of metastable helium. *Physical Review Letters*, **86** (16), 3459–62.

84. Drell, P.S. and Commins, E.D. (1985). Parity nonconservation in atomic thallium. *Physical Review A*, **32** (4), 2196–2210.
85. Duarte, F.J. and Hillman, L.W. (1990). *Dye laser principles*. Academic Press, Boston.
86. Dzuba, V.A., Flambaum, V.V., and Khriplovich, I.B. (1986). Enhancement of P-nonconserving and T-nonconserving effects in rare-earth atoms. *Zeitschrift Fur Physik D*, **1** (3), 243–5.
87. Edmonds, A.R. (1996). *Angular momentum in quantum mechanics*. Princeton University Press, Princeton.
88. Fano, U. and Racah, G. (1959). *Irreducible tensorial sets*. Academic Press, New York.
89. Faraday, M. (1855). *Experimental research* (London), **III**, 2164.
90. Fedichev, P.O., Reynolds, M.W., Rahmanov, U.M., and Shlyapnikov, G.V. (1996). Inelastic decay processes in a gas of spin-polarized triplet helium. *Physical Review A*, **53** (3), 1447–53.
91. Fermi, E. and Segrè, E. (1933). *Zeitschrift für Physik*, **82**, 729.
92. Fischer, C.H., Brage, T., and Jönsson, P. (1997). *Computational atomic structure: an MCHF approach*. Institute of Physics, Bristol.
93. Flambaum, V.V. and Hanhart, C. (1993). Magnetic interaction between relativistic atomic electrons and parity nonconserving nuclear moments. *Physical Review C*, **48** (3), 1329–34.
94. Flambaum, V.V. and Khriplovich, I.B. (1980). P-odd nuclear-forces - a source of parity violation in atoms. *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki*, **79** (5), 1656–63; English translation: *Soviet Physics, Journal of Experimental and Theoretical Physics (JETP)*, **52**, 835–42.
95. Flambaum, V.V. and Murray, D.W. (1997). Anapole moment and nucleon weak interactions. *Physical Review C*, **56** (3), 1641.
96. Fowles, G.R. (1975). *Introduction to modern optics*. Dover, New York.
97. Gabrielse, G. (2001). Comparing the antiproton and proton, and opening the way to cold antihydrogen. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **45**, 1–39.
98. Gabrielse, G., Hall, D.S., Roach, T., Yesley, P., Khabbaz, A., Estrada, J., Heimann, C., and Kalinowsky, H. (1999). The ingredients of cold antihydrogen: simultaneous confinement of antiprotons and positrons at 4 K. *Physics Letters B*, **455** (1–4), 311–15.
99. Gabrielse, G., Hanneke, D., Kinoshita, T., Nio, M., and Odom, B. (2006). New determination of the fine structure constant from the electron  $g$  value and QED. *Physical Review Letters*, **97** (3), 030802.
100. Gabrielse, G., *et al.* [ATRAP Collaboration] (2002). Background-free observation of cold antihydrogen with field-ionization analysis of its states. *Physical Review Letters*, **89** (21), 213401.
101. Gamblin, R.L. and Carver, T.R. (1965). Polarization and relaxation processes in  $^3\text{He}$  gas. *Physical Review*, **138** (4A), 946.
102. Gangl, M. and Ritsch, H. (2000). Collective dynamical cooling of neutral particles in a high-Q optical cavity. *Physical Review A*, **61**, (1), 011402/1–4.
103. Ghosh, P.K. (1995). *Ion traps*. Oxford University Press, Oxford.
104. Glashow, S.L. (1961). Partial symmetries of weak interactions. *Nuclear Physics*, **22** (4), 579.
105. Goldenberg, H.M., Kleppner, D., and Ramsey, N.F. (1961). Atomic beam resonance experiments with stored beams. *Physical Review*, **123** (2), 530–7.
106. Golub, R., Jewell, C., Ageron, P., Mampe, W., Heckel, B., and Kilvington, I. (1983). Operation of a superthermal ultracold neutron source and the storage of ultracold neutrons in superfluid  $^4\text{He}$ . *Zeitschrift für Physik B*, **51** (3), 187–93.

107. Golub, R., Richardson, D., and Lamoreaux, S. K. (1991). *Ultra-cold neutrons*. Adam Hilger, Bristol.
108. Griffiths, D. (1987). *Introduction to elementary particles*. Wiley, New York.
109. Griffiths, D. (1995). *Introduction to quantum mechanics*. Prentice-Hall, Upper Saddle River.
110. Griffiths, D. (1999). *Introduction to electrodynamics*. Prentice-Hall, Upper Saddle River.
111. Guéna, J., Chauvat, D., Jacquier, Ph., Jahier, E., Lintz, M., Papoyan, A. V., Sanguinetti, S., Sarkisyan, D., Wasan, A., and Bouchiat, M. A. (2003). New manifestation of atomic parity violation in cesium: a chiral optical gain induced by linearly polarized  $6S \rightarrow 7S$  excitation. *Physical Review Letters*, **90** (14), 143001.
112. Guidoni, L. and Verkerk, P. (1999). Optical lattices: cold atoms ordered by light. *Journal of Optics B*, **1** (5), R23-R45.
113. Gustavson, T. L., Bouyer, P., and Kasevich, M. A. (1997). Precision rotation measurements with an atom interferometer gyroscope. *Physical Review Letters*, **78** (11), 2046–9.
114. Gustavson, T. L., Landragin, A., and Kasevich, M. A. (2000). Rotation sensing with a dual atom-interferometer Sagnac gyroscope. *Classical and Quantum Gravity*, **17** (12), 2385–98.
115. Hahn, E. L. and Maxwell, D. E. (1952). Spin echo measurements of nuclear spin coupling in molecules. *Physical Review*, **88** (5), 1070–84.
116. Hall, J. L., Ye, J., Diddams, S. A., Long-Sheng, M., Cundiff S. T., and Jones, D. J. (2001). Ultrasensitive spectroscopy, the ultrastable lasers, the ultrafast lasers, and the seriously nonlinear fiber: a new alliance for physics and metrology. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **37** (12), 1482–92.
117. Hannay, J. H. (1985). Angle variable holonomy in adiabatic excursion of an integrable Hamiltonian. *Journal of Physics A – Mathematical and General*, **18** (2), 221–30.
118. Hänsch, T. W. (1972). Repetitively pulsed tunable dye laser for high-resolution spectroscopy. *Applied Optics*, **11** (4), 895.
119. Happer, W. (1971). Light propagation and light shifts in optical pumping experiments. *Progress in Quantum Electronics*, **1** (2), 51.
120. Happer, W. (1972). Optical pumping. *Reviews of Modern Physics*, **44** (2), 169–249.
121. Happer, W. and Tam, A. C. (1977). Effect of rapid spin exchange on the magnetic-resonance spectrum of alkali vapours. *Physical Review A*, **16**, (5), 1877–91.
122. Happer, W. and Tang, H. (1973). Spin-exchange shift and narrowing of magnetic resonance lines in optically pumped alkali vapours. *Physical Review Letters*, **31** (5), 273–6.
123. Happer, W. and van Wijngaarden, W. A. (1987). An optical-pumping primer. *Hyperfine Interactions*, **38** (1–4), 435–70.
124. Happer, W., Walker, T., and Bonin, K. (2003). *Optical pumping: principles and applications*. Springer-Verlag, Berlin.
125. Haroche, S. (1976). *Quantum beats and time-resolved fluorescence spectroscopy*. Springer-Verlag, Berlin.
126. Harris, S. E. (1997). Electromagnetically induced transparency. *Physics Today*, **50** (7), 36–42.
127. Heitler, W. (1954). *The quantum theory of radiation*. Oxford University Press, London.
128. Henkel, C., Kruger, P., Folman, R., and Schmiedmayer, J. (2003). Fundamental limits for coherent manipulation on atom chips. *Applied Physics B*, **76** (2), 173–82.
129. Herzberg, G. (1944). *Atomic spectra and atomic structure*. Dover, New York.
130. Herzberg, G. (1971). *The spectra and structures of simple free radicals; an introduction to molecular spectroscopy*. Cornell University Press, Ithaca.
131. Herzberg, G. (1989). *Molecular spectra and molecular structure*, Volume 1: *Spectra of diatomic molecules*. R. E. Krieger, Malabar, FL.



132. Hinds, E. A. (1988). Radiofrequency spectroscopy. In *The Spectrum of Atomic Hydrogen: Advances* (ed. G. W. Series), pp. 245–92. World Scientific, Singapore.
133. Hoffnagle, J. A. (1982). “Measurement of the forbidden  $6s_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$  transition in atomic cesium.” Dissertation for the degree of Doctor of Natural Sciences, Swiss Federal Institute of Technology.
134. Holscheiter, M. H. and Charlton, M. (1999). Ultra-low energy antihydrogen. *Reports on Progress in Physics*, **62** (1), 1–60.
135. Honig, R. E. and Kramer, D. A. (1969). Vapor pressure data for the solid and liquid elements. *RCA Review*, **30**, 285–305.
136. Huard, S. (1997). *Polarization of light*. Wiley, New York.
137. Huffman, P. R., Brome, C. R., Butterworth, J. S., Coakley, K. J., Dewey, M. S., Dzhosyuk, S. N., Golub, R., Greene, G. L., Habicht, K., Lamoreaux, S. K., Mattoni, C. E. H., McKinsey, D. N., Wietfeldt, F. E., and Doyle, J. M. (2000). Magnetic trapping of neutrons. *Nature*, **403** (6765), 62–4.
138. Humphries, S. (1986). *Principles of charged particle acceleration*. Wiley, New York.
139. Jackson, J. D. (1975). *Classical electrodynamics*. Wiley, New York.
140. Jones, D. J., Diddams, S. A., Ranka, J. K., Stentz, A., Windeler, R. S., Hall, J. L., and Cundiff, S. T. (2000). Carrier-envelope phase control of femtosecond mode-locked laser and direct optical frequency synthesis. *Science*, **288** (5466), 635–9.
141. Jones, R. C. (1941). A new calculus for the treatment of optical systems. *Journal of the Optical Society of America*, **31**, 488–93.
142. Kasevich, M. and Chu, S. (1992). Laser cooling below a photon recoil with three-level atoms. *Physical Review Letters*, **69** (12), 1741–4.
143. Kazantsev A. P., Smirnov, V. S., Tumaikin, A. M., and Yagofarov, A. (1985). Effect of spontaneous-photon recoil on mixing of atomic multipole moments in a polarized external field. *Optika i Spektroskopiya*, **58** (3), 500–6.
144. Ketterle, W. (2002). Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Reviews of Modern Physics*, **74** (4), 1131–51.
145. Ketterle, W. and Inouye, S. (2001). Collective enhancement and suppression in Bose-Einstein condensates. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Serie IV (Physique, Astrophysique)*, **2** (3), 339–80.
146. Khriplovich, I. B. (1991). *Parity nonconservation in atomic phenomena*. Gordon and Breach, Philadelphia.
147. Khriplovich, I. B. and Lamoreaux, S. K. (1997). *CP violation without strangeness: electric dipole moments of particles, atoms, and molecules*. Springer, Berlin.
148. King, W. H. (1963). Comments on article peculiarities of isotope shift in samarium spectrum. *Journal of the Optical Society of America*, **53**, (5), 638.
149. King, W. H. (1984). *Isotope shifts in atomic spectra*. Plenum Press, New York.
150. Kinoshita, T. (1996). The fine structure constant. *Reports on Progress in Physics*, **59**, 1459–92.
151. Kittel, C. (1996). *Introduction to solid state physics*. Wiley, New York.
152. Kittel, C. and Kroemer, H. (1980). *Thermal physics*. W. H. Freeman, San Francisco.
153. Knize, R. J., Wu, Z., and Happer, W. (1988). Optical pumping and spin exchange in gas cells. *Advances in Atomic and Molecular Physics*, **24**, 223–67.
154. Kocharovskaya, O. (1992). Amplification and lasing without inversion. *Physics Reports*, **219** (3–6), 175–90.
155. Kominis, I. K., Kornack, T. W., Allred, J. C., and Romalis, M. V. (2003). A sub-femtotesla multi-channel atomic magnetometer. *Nature*, **422**, (6932), 596–99.



156. Krainov, V. P., Reiss, H., and Smirnov, B. M. (1997). *Radiative processes in atomic physics*. Wiley, New York.
157. Lamoreaux, S. K. (1997). Demonstration of the Casimir force in the 0.6 to 6  $\mu\text{m}$  range. *Physical Review Letters*, **78** (1), 5–8.
158. Lamoreaux, S. K. (1999). Feeble magnetic fields generated by thermal fluctuations in extended metallic conductors: implications for electric-dipole moment experiments. *Physical Review A*, **60** (2), 1717.
159. Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1977). *Quantum mechanics*. Butterworth-Heinemann, Oxford.
160. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (2001a) *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. 5-е изд. М.: Физматлит, 2001. 808 с.
161. Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1987). *The classical theory of fields*. Pergamon Press, Oxford.
162. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (2001b) *Теория поля*. 8-е изд. М.: Физматлит, 2001. 534 с.
163. Landau, L. D., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P. (1995). *Electrodynamics of continuous media*. Butterworth-Heinemann, Oxford.
164. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (2003) *Теоретическая физика*. 4-е изд. М.: Физматлит, 2003. Т. VIII. *Электродинамика сплошных сред*. 656 с.
165. Letokhov, V. S. (1987). *Laser photoionization spectroscopy*. Academic Press, Orlando.
166. Loudon, R. (2000). *The quantum theory of light*. Oxford University Press, Oxford.
167. Loudon, R. and Knight, P. L. (1987). Squeezed light. *Journal of Modern Optics*, **34** (6–7), 709–59.
168. Lu, Z.-T., Bowers, C. J., Freedman, S. J., Fujikawa, B. K., Mortara, J. L., Shang, S.-Q., Coulter, K. P., and Young, L. (1994). Laser trapping of short-lived radioactive isotopes. *Physical Review Letters*, **72** (24), 3791–4.
169. Macaluso, D. and Corbino, O. M. (1898). *Nuovo Cimento*, **8**, 257.
170. Major, F. G. (1998). *The quantum beat: the physical principles of atomic clocks*. Springer, New York.
171. Marion, J. B. and Thornton, S. T. (1995). *Classical dynamics of particles and systems*. Saunders College Pub., Fort Worth.
172. Massey, H. S. W. (1976). *Negative ions*. Cambridge University Press, Cambridge.
173. Masuhara, N., Doyle, J. M., Sandberg, J. C., Kleppner, D., Greytak, T. J., Hess, H. F., and Kochanski, G. P. (1988). Evaporative cooling of spin-polarized atomic hydrogen. *Physical Review Letters*, **61** (8), 935–8.
174. Messiah, A. (1966). *Quantum mechanics*. Wiley, New York.
175. Metcalf, H. J. and Van der Straten, P. (1999). *Laser cooling and trapping*. Springer-Verlag, Berlin.
176. Milner, V. and Prior, Y. (1999). Biaxial spatial orientation of atomic angular momentum. *Physical Review A*, **59** (3), R1738–41.
177. Milton, K. A. (2001). *The Casimir effect: physical manifestations of zero-point energy*. World Scientific, New Jersey.
178. Montgomery, R. (1991). How much does the rigid body rotate? A Berry's phase from the 18th century. *American Journal of Physics*, **59** (5), 394–8.
179. Nenonen, J., Montonen, J., and Katila, T. (1996). Thermal noise in biomagnetic measurements. *Review of Scientific Instruments*, **67** (6), 2397.
180. Nielsen, M. A. and Chuang, I. L. (2000). *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, Cambridge.

181. Nguyen, A. T., Budker, D., DeMille, D. and Zolotarev, M. (1997). Search for parity nonconservation in atomic dysprosium. *Physical Review A*, **56** (5), 3453–63.
182. Odom, B., Hanneke, D., D'Urso, B., and Gabrielse, G. (2006). New measurement of the electron magnetic moment using a one-electron quantum cyclotron. *Physical Review Letters*, **97** (3), 030801.
183. O'Hara, K. M., Hemmer, S. L., Gehm, M. E., Granade, S. R., and Thomas, J. E. (2002). Observation of a strongly interacting degenerate fermi gas of atoms. *Science*, **298** (5601), 2179–82.
184. Olshanii, M. and Weiss, D. (2002). Producing Bose-Einstein condensates using optical lattices. *Physical Review Letters*, **89** (9), 090404.
185. Omont, A. (1977). Irreducible components of density matrix – application to optical-pumping. *Progress in Quantum Electronics*, **5**, 69–138.
186. Pathria, R. K. (1996). *Statistical mechanics*. Butterworth-Heinemann, Oxford.
187. Paul, W. (1990). Electromagnetic traps for charged and neutral particles. *Reviews of Modern Physics*, **62** (3), 531–40.
188. Paul, W., Reinhard, H. P., and von Zahn, U. (1958). Das elektrische massenfilter als massenspektrometer und isotopentrenner. *Zeitschrift für Physik*, **152**, 143–82.
189. Pethick, C. J. and Smith, H. (2002). *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, Cambridge.
190. Phillips, W. D. (1998). Nobel lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Reviews of Modern Physics*, **70** (3), 721–41.
191. Pritchard, D. E., Raab, E. L., Bagnato, V., Wieman, C. E., and Watts, R. N. (1986). Light traps using spontaneous forces. *Physical Review Letters*, **57** (3), 310–313.
192. Purcell, E. M. (1985). *Electricity and Magnetism*. McGraw-Hill, New York.
193. Purcell, E. M. and Ramsey, N. F. (1950). On the possibility of electric dipole moments for elementary particles and nuclei. *Physical Review*, **78**, (6), 807.
194. Quint, W. (2001). The g-Factor of the bound electron in hydrogenic ions. In *Atomic Physics 17* (ed. E. Arimondo, P. De Natale, and M. Inguscio), American Institute of Physics Conference Proceedings, Vol. 551, pp. 282–9. AIP, Melville, NY.
195. Raab, E., Prentiss, M. Cable, A., Chu, S., and Pritchard, D. (1987). Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. *Physical Review Letters*, **59** (23), 2631–4.
196. Radzig, A. A. and Smirnov, B. M. (1985). *Reference data on atoms, molecules, and ions*. Springer-Verlag, Berlin.
197. Ramsey, N. (1985). *Molecular beams*. Clarendon Press, Oxford.
198. Regan, B. C., Commins, E. D., Schmidt, C. J., and DeMille, D. (2002). New limit on the electron electric dipole moment. *Physical Review Letters*, **88** (7), 071805.
199. Reif, F. (1965). *Fundamentals of statistical and thermal physics*. McGraw-Hill, New York.
200. Robert, A., Sirjean, O., Browaeys, A., Poupard, J., Nowak, S., Boiron, D., Westbrook, C. I., and Aspect, A. (2001). A Bose-Einstein condensate of metastable atoms. *Science*, **292** (5516), 461–64.
201. Rochester, S. and Budker, D. (2001). Atomic polarization visualized. *American Journal of Physics*, **69** (4), 450–4.
202. Rolston, S. (1998). Optical lattices. *Physics World*, **11** (10), 27–32.
203. Sachs, R. G. (1987). *The physics of time reversal*. University of Chicago Press, Chicago.
204. Sakurai, J. J. (1967). *Advanced quantum mechanics*. Addison-Wesley, New York.
205. Sakurai, J. J. (1994). *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley, New York.
206. Salam, A. (1968). In *Elementary particle theory, relativistic groups and analyticity*, Nobel Symposium, No. 8 (ed. N. Svartholm), 367. Wiley, New York.

- 
207. Sandars, P. G. H. (1965). Electric dipole moment of an atom. *Physics Letters*, **14** (3), 194.
208. Santarelli, G., Laurent, Ph., Lemonde, P., Clairon, A. Mann, A. G., Chang, S., Luiten A. N., and Salomon, C. (1999). Quantum projection noise in an atomic fountain: a high stability cesium frequency standard. *Physical Review Letters*, **82** (23), 4619–22.
209. Sargent, M., Scully, M. O., and Lamb, W. E. (1977). *Laser physics*. Addison-Wesley, Reading, MA.
210. Schafer, F. P., Schmidt, W., and Volze, J. (1966). Organic dye solution laser. *Applied Physics Letters*, **9** (8), 306.
211. Schearer, L. D. and Walters, G. K. (1965). Nuclear spin-lattice relaxation in the presence of magnetic-field gradients. *Physical Review*, **139** (5A), 1398.
212. Schiff, L. I. (1963). Measurability of nuclear electric dipole moments. *Physical Review*, **132** (5), 2194–2200.
213. Schlessner, R. and Weis, A. (1992). Light-beam deflection by cesium vapor in a transverse magnetic field. *Optics Letters*, **17** (14), 1015–17.
214. Schneider, J. and Wallis, H. (1998). Mesoscopic Fermi gas in a harmonic trap. *Physical Review A*, **57** (2), 1253–9.
215. Scully, M. O. and Zubairy, M. S. (1997). *Quantum optics*. Cambridge University Press, Cambridge.
216. Semertzidis, Y. K. *et al.* [Muon EDM Collaboration] (2001). A sensitive search for a muon electric dipole moment. In *Quantum Electrodynamics and Physics of the Vacuum: QED 2000* (ed. G. Cantatore). American Institute of Physics Conference Proceedings, Vol. 564, pp. 263–8. AIP, Melville, NY.
217. Shankar, R. (1994). *Principles of quantum mechanics*. Plenum Press, New York.
218. Siegman, A. E. (1986). *Lasers*. University Science Books, Mill Valley.
219. Silver, J. (2001). Tests of quantum electrodynamics in hydrogenic ions. In *Atomic Physics 17* (ed. E. Arimondo, P. De Natale, and M. Inguscio). American Institute of Physics Conference Proceedings, Vol. 551, pp. 282–9. AIP, Melville, NY.
220. Slichter, C. P. (1990). *Principles of magnetic resonance*. Springer-Verlag, Berlin.
221. Smith, J. H., Purcell, E. M., and Ramsey, N. F. (1957). Experimental limit to the electric dipole moment of the neutron. *Physical Review*, **108** (1), 120–2.
222. Sobelman, I. I. (1992). *Atomic spectra and radiative transitions*. Springer-Verlag, Berlin.
223. Soffer, B. H. and McFarland, B. B. (1972). Continuously tunable narrow-band organic dye laser. *Applied Physics Letters*, **10** (10), 266.
224. Sorokin, P. P. and Lankard, J. R. (1966). Stimulated emission observed from an organic dye chloro-aluminum phthalocyanine. *IBM Journal of Research and Development*, **10** (2), 162–3.
225. Stenholm, S. (1984). *Foundations of laser spectroscopy*. Wiley, New York.
226. Storey, P. and Cohen-Tannoudji, C. (1994). The Feynman path integral approach to atomic interferometry. A tutorial. *Journal de Physique II*, **4** (11), 1999–2027.
227. Townes, C. H. and Schawlow, A. L. (1975). *Microwave spectroscopy*. Dover, New York.
228. Trigg, G. L. (1975). *Landmark experiments in twentieth century physics*. Crane Russak, New York.
229. Udem, T., Holzwarth, R., and Hänsch, T. W. (2002). Optical frequency metrology. *Nature*, **416** (6877), 233–7.
230. Van Dyck, Jr., R. S., Ekstrom, P., and Dehmelt, H. G. (1976). Axial, magnetron, cyclotron, and spin-cyclotron beat frequencies measured on single electron almost at rest in free space (geonium). *Nature*, **262**, 776.

231. Van Dyck, Jr., R. S., Schwinberg, P. B., and Dehmelt, H. G. (1978). Electron magnetic moment from geonium spectra. In *New Frontiers in High Energy Physics* (eds. B. Kursunoglu, A. Perlmutter, and L. F. Scott. Plenum, New York).
232. Van Dyck, Jr., R. S., Schwinberg, P., and Dehmelt, H. (1987). New high-precision comparison of electron and positron  $g$  factors. *Physical Review Letters*, **59** (1), 26–9.
233. Vandenbosch, R., Will, D. I., Cooper, C., Henry, B., and Liang, J. F. (1997). Alkali carbide fragmentation, a new path to doubly-charged negative ions. *Chemical Physics Letters*, **274** (1–3), 112–4.
234. Varshalovich, D. A., Moskalev, A. N., and Khersonskii, V. K. (1988). *Quantum theory of angular momentum: irreducible tensors, spherical harmonics, vectors coupling coefficients, 3nj symbols*. World Scientific, Singapore; Варшалович Д. А., Москалев А. Н. и Херсонский В. К. *Квантовая теория углового момента. Аппарат неприводимых тензоров, сферические функции, 3nj-символы*. Л.: Наука, 1975.
235. Vuletic, V. and Chu, S. (2000). Laser cooling of atoms, ions, or molecules by coherent scattering. *Physical Review Letters*, **84** (17), 3787–90.
236. Walls, D. F. and Milburn, G. J. (1995). *Quantum optics*. Springer, Berlin.
237. Weinberg, S. (1967). A model of leptons. *Physical Review Letters*, **19** (21), 1264–6.
238. Weiping, Z., Sackett, C. A., and Hulet, R. G. (1999). Optical detection of a Bardeen–Cooper–Schrieffer phase transition in a trapped atomic gas of fermionic atoms. *Physical Review A*, **60** (1), 504–7.
239. Wertheim, G. K. (1964). *Mossbauer effect: principles and applications*. Academic Press, New York.
240. Wolfenden, T. D. and Baird, P. E. G. (1993). An experimental search for enhanced parity nonconserving optical-rotation in samarium. *Journal of Physics B*, **26** (7), 1379–87.
241. Wood, C. S., Bennett, S. C., Cho, D., Masterson, B. P., Roberts, J. L., Tanner, C. E., and Wieman, C. E. (1997). Measurement of parity nonconservation and an anapole moment in cesium. *Science*, **275** (5307), 1759–63.
242. Yariv, A. (1989). *Quantum electronics*. Wiley, New York.
243. Yariv, A. and Yeh, P. (1984). *Optical waves in crystals: propagation and control of laser radiation*. Wiley, New York.
244. Yashchuk, V. V., Budker, D., Gawlik, W., Kimball, D. F., Malakyan, Yu. P., and Rochester, S. M. (2003). Selective addressing of high-rank atomic polarization moments. *Physical Review Letters*, **90** (25), 253001/1–4.
245. Ye, J. and Hall, J. L. (2000). Cavity ringdown heterodyne spectroscopy: high sensitivity with microwatt light power. *Physical Review A*, **61** (6), 061802/1–4.
246. Zare, R. N. (1988). *Angular momentum: understanding spatial aspects in chemistry and physics*. Wiley, New York.
247. Zel'dovich, Ya. B. (1958). Electromagnetic interaction with parity violation. *Soviet Physics JETP*, **6** (6), 1184–6.
248. Zel'dovich, Ya. B. (1959). Parity nonconservation in the 1st order in the weak-interaction constant in electron scattering and other effects. *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki*, **36**, 964.
249. Zolotarev, M. and Budker, D. (1997). Parity nonconservation in relativistic hydrogenic ions. *Physical Review Letters*, **78** (25), 4717–20.

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- $\alpha$ -линия Лаймана 192  
 $\beta$ -распад 328  
 $\pi$ -импульс 89, 169  
 $\pi$ -поляризация 149, 154  
 $\sigma$ -поляризация 149, 153, 241
- CPT-инвариантность 70
- D-линия 353
- ICI 279
- J-связь 286
- LRC-контур 298
- TEM<sub>00</sub>-мода 261
- Z<sub>0</sub>-бозон 61
- Адиабатическая эволюция 175, 259  
Адиабатическое прохождение 89  
— следование 92  
Аксиальный вектор (псевдовектор) 62, 200, 209  
Акустооптическое устройство сдвига частоты 291  
Алюминий 322  
Анапольный момент 61, 73  
Ангармонический осциллятор 271  
Антиводород 70  
Антирелаксационное покрытие 103, 218, 221, 224  
Античастицы 71  
Атом щелочного металла 202, 353  
Атомная ловушка 93, 248, 266  
Атомные единицы 348  
— часы 28, 211, 222, 235  
Атомный пучок 49, 164, 213, 237, 245, 248
- Биомагнетизм 323  
Биомагнитное формирование изображений 231  
Бозе-эйнштейновский конденсат (БЭК) 171, 232, 235, 248, 258  
— — — энергия 256  
— — — энтропия 257  
Бозоны 20, 249, 258, 276  
Боковые частоты 94, 222, 294, 296, 320  
Большая функция распределения 253  
Боровский радиус 15, 33, 348  
Буферный газ 104, 110, 217, 230
- Вакуумное состояние 301  
Валентный электрон 56  
Вектор Джона 307, 357  
— Пойнтинга 138, 199, 201, 349  
— поляризации 336  
Векторная частица 336  
Векторное тождество 201  
Векторный момент 375  
— оператор 54, 160, 364, 365  
— потенциал  $\vec{A}$  38, 73, 74, 123, 127, 131  
Виртуальное состояние 172  
Висмут 61  
Водород 17, 25, 28–30, 32, 33, 62, 67, 68, 70, 71, 80, 85, 110, 191, 193, 207, 353, 381  
Водородоподобные ионы 32, 110  
Возвращающая сила 239, 242  
Волновая функция водорода 29, 67, 81, 193, 288  
— — молекулы 276, 282, 355  
— — составная 337  
Волновое уравнение 124  
Волновой вектор 123, 182, 199, 237, 290, 316  
Волновые числа 271  
Волоконно-оптический кабель 298, 316, 320  
— фотонные кристаллы 320  
Восприимчивость линейная 181, 379  
— нелинейная 379

- Вращательная постоянная 272, 281, 282  
Вращательно-колебательная структура 280, 312  
Вращательный уровень 272, 275, 279, 281  
Вращающаяся система координат 91, 96–98, 204, 214  
Время-инверсионная инвариантность 62, 64, 74, 76, 108, 144, 200, 208, 283  
Время-пролетное уширение 165  
Второй закон термодинамики 208  
Вырождение Ферми 266  
Вырожденный ферми-газ 266  
Выстраивание 333, 342, 375  
«Вытянутое» состояние 22, 230, 248, 340, 341, 344  
Вязкое сопротивление 237
- Гармонический осциллятор 24, 123, 243, 271, 274, 338  
Гауссово распределение 141, 218  
Гауссовый пространственный профиль (для лазерного пучка) 165  
— световой пучок 261  
Гегсадекапольный момент 375  
Гелий 184, 232  
— жидкий 185  
Генерация второй гармоники 302, 303  
Геометрическая фаза (фаза Берри) 113, 213  
Геометрический ряд 252  
Геоний 35  
— аксиальное движение 36, 38  
— магнетронное движение 36, 37, 40  
— уровни энергии 40, 41  
— циклотронное движение 36, 37, 39  
Гироманнитное отношение 89, 103, 109, 203, 326  
Гироскоп 292  
— волны материи 314  
— лазерный 314  
Главное квантовое число 17, 83  
Гомоядерная молекула 355  
Градиент сферические координаты 67
- Давление насыщенных паров 275  
— Ферми 45, 46  
Двуокись углерода 314  
Двупреломляющий фильтр 312  
Двухатомная молекула 225, 269, 270, 273, 282, 354  
— — относительное содержание 274
- Двухфотонный переход 191  
Дебай 349  
Действие масс закон 275, 277  
Дейтерий 70  
Декартов базис 67  
Декогеренция 108, 368  
Дельта-функция Дирака 130  
Детерминант Слетера 20  
Диаграмма Брейта–Раби 32  
— Кинга 49  
— Фейнмана 173, 175, 187, 332, 379  
— — вершина 379  
— — ребро 379  
Диада 366  
Диаманитный атом 109  
Димер 226, 274, 355  
Динамический эффект Зеемана 97  
— — Штарка 93, 96, 97, 99–102, 117, 350  
Диполь-дипольное взаимодействие 233, 286, 332  
Дискретное преобразование 60  
Дисперсия (случайной величины) 300  
— групповой скорости (ДГС) 319  
Диспрозий 161  
Дифракционная решетка 312  
Диффузия фазы 105  
Диэлектрическая постоянная 185  
Длина волны Де Бройля 249, 317  
— когерентности 311  
— поглощения 143, 183, 202  
Добротность 312  
Доплеровская ширина 141, 219, 351  
Доплеровский предел температуры 239  
— сдвиг 141, 220, 248, 290, 315  
Доплеровское уширение 49, 141, 147, 220
- Жесткий волчок** 282
- Закон действия масс** 275, 277  
— Малюса 305  
— Снелла 299  
— спиновой статистики 20  
«Замкнутый» переход 152, 245  
Зарядовое сопряжение 70  
Затухающие осцилляции 122  
Зеемановский замедлитель 245  
Золотое правило Ферми 128, 131, 137, 379
- Идеальный газ** 249  
Изобутан 314

- Изотопический сдвиг 49, 56  
— — массовый сдвиг 49  
— — — — аномальный 49, 52  
— — — — нормальный 49, 50  
— — молекулы 279  
— — объемный (полевой) сдвиг 49  
Импульс отдачи 236, 246  
— Ферми 44, 47  
Индекс модуляции 94, 222, 294  
— — фаза 297  
Индукция электрическая 185, 199  
Индукцированная лазером флуоресценция 49  
Интеркомбинационная линия 233  
Интерференция 120, 150  
Интерферометр 315  
— Фабри–Перо 313  
Ионизация Пеннинга 232  
Испарительное охлаждение 256
- Канонический импульс** 38, 131  
**Кант** 279  
**Канты вибронные** 279  
**Квадрупольный момент** 342, 375  
**Квазиклассическое приближение** (*см. полуклассическое (ВКБ) приближение*) 58  
**Квазичастицы** 48, 49  
**Квантовая теория поля** 72  
**Квантовые биения** 331, 334, 340  
— вычисления 255  
— флуктуации 300  
**Квантовый выход** 304  
— компьютер 108, 286  
**Кинетическое поле** 108  
— уравнение 154  
— усреднение 106  
**Когерентная суперпозиция** 159, 164, 170  
**Когерентное пленение населенностей** 159  
— состояние 301–303, 368  
**Колебательная постоянная** 272  
**Колебательный уровень** 270, 273, 276, 279, 281  
**Коллективное излучение** 169, 266  
**Комбинационное рассеяние** 168  
— — селективное по скорости 241  
**Компас** 326  
**Константа упругости** 269, 273, 281  
**Контактное взаимодействие** 73  
— — Ферми 178  
**Контур Фохта** 147  
**Конфигурационное смешивание** 178  
**Конфигурация Литтрова** 312
- Кооперативное излучение** 169  
**Коэффициенты векторного сложения** 16  
— векторной связи 16  
— Вигнера 16  
— Клебша–Гордона 16, 55, 67, 128, 134, 137, 149, 153, 160, 198, 288, 336, 361  
— Эйнштейна *A* и *B* 139, 144  
«Красная» отстройка 236  
**Критический угол** 299  
**Кубиты** 108  
**Кулоновская калибровка** 79, 123, 131, 132  
**Куперовская пара** 266
- Лазер Ti-сапфир** 318  
— на красителе 312  
— — — импульсный 312  
— — — непрерывный 312  
— непрерывный 318  
— фемтосекундный 318  
**Лазерная спектроскопия** 49, 61, 279, 312  
**Лазерное охлаждение** 93, 102, 235, 248, 256, 266  
**Лазерный нагрев** 292  
**Ларморова прецессия** 98, 106, 204, 341  
— частота 85, 89, 103, 108, 189, 203, 230, 326, 373  
**Линейная поляризация** 158, 308, 333  
**Линейное двулучепреломление** 344  
**Линейный дихроизм** 344  
— поляризатор 357  
**Линия 21 см** 28, 30  
**Ловушка дипольная** 258  
— магнитооптическая 241  
— Пеннинга 35, 36, 70, 209  
— Поля 338  
**Лорентцева инвариантность** 70  
— форма линия 137, 146, 181, 219, 222, 298, 329  
**Лэмбовский сдвиг** 62, 68, 191
- Магический угол** 112, 331, 332  
**Магнетон Бора** 15, 109, 181, 349  
**Магнетронное движение** 36  
**Магнитная восприимчивость** 293  
— индукция 350  
**Магнитно-дипольный переход** 141  
**Магнитное отклонение света** 199  
— поле 350  
— — вызванное движением 108, 213  
— — градиент 103



Магнитный дипольный момент 75, 89, 189  
 — квадрупольный момент 77, 78  
 — момент 326, 349  
 — резонанс 88, 117, 213, 286, 332  
 Магнитометр 231, 322  
 —  $M_x$ -схема 202  
 — оптическая накачка 88, 202  
 — темная зона 204  
 Магнитометры с оптической накачкой 88  
 Магнитооптическая ловушка (МОЛ) 241, 245  
 Магнитооптические эффекты 180, 198  
 Мазер 28  
 Макросостояние 208  
 Максвелловское распределение по скоростям 141  
 Масс-спектрометр квадрупольный 338  
 Масштабное преобразование 79  
 Матрица Джонса 307  
 — плотности 108, 110, 118, 158, 333, 341, 368  
 — — усреднение по ансамблю 371  
 — поворота 111, 114, 190, 340, 359  
 — релаксации 374  
 Матрицы Паули 66, 98, 372  
 Маятник Капицы 338  
 Мгновенный базис 114  
 Межъядерное расстояние 269  
 Метастабильное состояние 144, 232  
 Метод Раби 212  
 — разнесенных осциллирующих полей Рамсея 211  
 — шарковской интерференции 61, 85, 194  
 Микросостояние 208, 251  
 Множители Лагранжа 229  
 Мода электромагнитного поля 123, 127  
 Модель Томаса–Ферми 43, 45, 46, 57  
 Модуляционная поляриметрия 309  
 Момент инерции 273, 281, 282, 327  
 Монопольный момент 375  
 Мультиполь состояния 340, 374  
  
**Накопительные кольца** 110  
 Наложение импульсов 310  
 Намагниченная сфера 88  
 Нарушение СР-симметрии 70, 208  
 — Т-симметрии 62, 64, 74, 76, 108, 200, 208, 283  
 — С-симметрии 71  
 Населенность 371, 375

Натрий 237  
 Недоуспокоенный режим 243  
 Нейтральный слабый ток 61  
 Нейтрон 49, 62, 108, 206, 286, 287, 328, 329  
 — магнитный момент 349  
 — масса 15  
 Некогерентный ансамбль 368  
 Нелинейная оптика 142, 187, 235, 302  
 Неоднородное уширение 142, 147  
 Непрерывное преобразование 60  
 Неприводимое тензорное произведение 195  
 Неприводимые тензорные операторы 361  
 Неприводимый тензор 194–196, 367  
 Неравенство треугольника 27  
 Несохранение четности 56, 61, 62, 70, 74, 85, 108, 178, 194, 208, 209  
 Несущая частота 296  
 Нечетное состояние 355  
 Нормальное распределение 219  
 Нормировка на полость 124, 129  
 Нумерология 335  
 НШНВ (полная ширина на полувысоте) 174  
  
**Область Релея** 261  
 — свободной дисперсии 313, 314  
 Обменное взаимодействие 23, 225  
 Общая теория относительности 127  
 Объем моды 261, 311  
 Однородная ширина 141, 183  
 Однородное уширение 139, 147, 238  
 Одноэлектронный атом гамильтониан 131  
 Октава 318  
 Окупольный момент 375  
 Оператор повышения 338  
 — — простой гармонический осциллятор 25, 127  
 — — угловой момент 55, 228, 288, 362  
 — понижения 338  
 — — простой гармонический осциллятор 25, 127  
 — — угловой момент 55, 228, 288, 362  
 — рождения 127, 133, 300  
 — уничтожения 127, 133, 300  
 — числа частиц 128, 301  
 Оптическая меласса 236, 241  
 — накачка 142, 152, 157, 212, 224, 228, 235, 336, 375  
 — решетка 258  
 — толщина 142  
 Оптический резонатор 260, 297, 311



- Оптическое вращение 61  
Ориентация 333, 343, 375, 378  
Осцилляции Раби 122, 172  
Ось молекулы 354  
Открытая система 376  
Относительная плотность 351  
Отрицательный ион 52
- П**  
Парамагнитный атом 109, 210, 326  
Параметр насыщения 142, 152, 163, 213, 238, 244, 245, 350  
— Стокса 151, 198, 356  
Параметрическое усиление 303  
Парциальная ширина 136, 140  
Переуспокоенный режим 122, 243, 244  
Переход, индуцированный эффектом Штарка 194  
— с переворотом спина 233  
Переходы, индуцированные столкновениями 312  
Периодическое возмущение 89, 93, 117, 118  
«Плененное» состояние 158  
Плотность состояний 44, 129  
Показатель преломления 181, 185, 200, 202, 261, 298, 314, 319  
— — воздуха 314  
Полевая ионизация 110  
— ширина линии 147  
Полевое уширение 146, 175, 177  
Полином Лежандра 112, 332, 334  
— — рекурсивная формула 284  
Полное внутреннее отражение 299  
Полость накопления энергии 311  
Полуволновая пластинка 307, 357  
Полуклассическое (ВКБ) приближение 43, 47, 58  
Поляризационные моменты 158, 340  
Поляризация атомная 340, 371, 375  
Поляризуемость магнитная проводящая сфера 293  
— перехода 197  
— электрическая 80, 83, 185, 261  
— — основное состояние водорода 82  
— — перехода 197  
— — проводящая сфера 293  
— — скалярная 111  
— — тензор 111, 345  
Полярные молекулы 207  
Полярный вектор 62, 209  
Поперечная релаксация 203  
Постоянная Больцмана 15, 141  
— Керра 184  
— Планка 350  
— Ридберга 15, 269, 280, 348  
— тонкой структуры  $\alpha$  15, 348  
— Ферми  $G_F$  62  
Постулат симметризации 20  
Потенциал Ван дер Ваальса 225  
— ионизации 348  
— межатомного взаимодействия 226, 270, 272  
— Морзе 270  
Правила Хунда 18, 22, 24  
Правило интервалом Ланде 27  
— отбора  $0 \leftrightarrow 0$  337  
— — по четности 178  
Право-левая симметрия 60  
Предел дробового шума 302, 306  
— Шавлова–Таунса 218, 312  
Представление взаимодействия 100, 118  
Преобразование Фурье 166, 220, 298, 321, 329  
Приближение ВКБ 58, 59  
— вращающейся волны 96, 98, 99, 204, 215  
— центрального поля 17  
Приведенная масса 270, 273, 280  
Приведенный матричный элемент 134, 137, 140, 186, 361  
Принцип запрета Паули 20, 21  
Проводимость 322  
Проводящая сфера 52, 80, 83, 293  
Продольная мода 313  
— релаксация 103, 203  
Пропагатор 380  
Простой гармонический осциллятор 24, 36, 39, 123, 243, 271, 274, 338  
— — — гамильтониан 125  
— — — оператор понижения 25, 127  
Пространственная инверсия 60  
Протон  $g$ -фактор Ланде 29  
— магнитный момент 31, 349  
— масса 15  
Псевдоспин 170  
Пуассоново распределение 218, 302, 305
- Р**  
Радиационные поправки 69  
Радиационный захват 143, 169, 236  
Разложение Тейлора 74, 163, 254  
Ранг тензора 366

Рассел-саундеровская ( $L$ – $S$ ) схема связи  
18, 26

Рассеяние вперед 188  
— света 294

Расчетный метод Джонса 307

Редкоземельные атомы 64, 224

Резонаторное охлаждение 260, 265

Релаксация 118

**Самарий 49**

Самовращение эллипса поляризации 303

Самомодуляция 320

Свертка тензора 77

Сверхзвуковая ракета 248

Сверхизлучение Дике 143, 169

Сверхпроводимость 249

Сверхскоростная лазерная система 318

Сверхтекучесть 249, 266

Сверхтонкая структура 28, 33, 35, 54, 56,  
179, 331

Сверхтонкое взаимодействие 28, 35, 53, 178,  
230, 286, 287

Светлое состояние 153, 155, 160

Световод 298

— угол приема 299

Светоделитель 303

— поляризационный (ПСД) 305

Свободная длина пробега 107, 217, 223

Свободный радикал 274

СВЧ переход 221

Сдвиг Блоха-Зигерта 102, 103

Секулярное уравнение 31, 185, 193, 207

Серебро 293

Сечение поглощения 139, 142

— столкновений 217

Сжатие по фазе 303

— — числу фотонов 303

Сжатые состояния 302, 304, 306

Сизифиви охлаждение 241

Символ Кронекера 115, 374

Синхронизация мод 319

— — методом керровской фокусировки 319

Синхронный детектор 202, 310

Скалярная поляризуемость 111

— связь 286

Скалярный оператор 54, 178, 288, 363

— потенциал 124

Скачки мод 314

Скоростная группа 147

Скорость наиболее вероятная 246, 249

— света 348, 350

— спонтанного затухания 135, 152, 191, 381

Слабый заряд 68, 70

— ядерный заряд 62

Случайное блуждание 105, 218, 223, 230,  
240

Смешанное состояние 369

Соленоид 245, 350

Соотношение неопределенностей Гейзенбер-  
га 47, 63, 132, 300

— полноты 81

Состояние минимальной неопределенности  
301

— равновесия 229

Спектр мощности 331

Спектральное распределение 166

Спектральные линии 49, 105, 218, 220, 279,  
312

Спектроанализатор 290

Спектрометр 298

Спектроскопические обозначения 18, 274,  
354

Спектроскопия затухания резонатора (СЗР)  
297

Спиновая мультипольность 354

— спираль 72

— температура 228, 230

Спиновый обмен 224, 228, 230, 233

— — оператор 225

— — сечение 227

Спин-орбитальное взаимодействие 25, 362

Спинорное представление 98, 214, 359

Сплав CO-NETIC 322

Спонтанное излучение 123, 128, 130, 134,  
135, 144, 147, 154, 155, 162, 167, 169,  
171, 174–177, 218, 235, 236, 240, 246,  
368, 374, 381

Среднеквадратичный 109, 265, 269, 322

Стандартная модель электрослабого взаи-  
модействия 61, 209

Стандартное отклонение 300, 303, 305

Стандартные условия 351

Стандартный квантовый предел 300, 306

Статистика Ферми 23

Статистическая смесь 371

Статистический вес 232

Стимулированное излучение 128, 144, 169,  
238, 246

— поглощение 136, 144, 246

Столкновения, меняющие скорость 108, 221  
— с рандомизацией электронов 230  
Столкновительная релаксация 144, 224, 368  
Столкновительное уширение 312  
Стохастическое охлаждение 266  
Стрела времени 208  
Субдоплеровское охлаждение 241  
Сужение Дике 107, 222  
Суперсимметрия 209  
Сферическая гармоника 283, 333  
Сферический базис 67, 134, 138, 160, 288, 364  
Схема  $j$ - $j$  связи 18

Таллий 61, 207  
Темновой вход 304  
Темное состояние 153, 155, 159, 214, 245  
— — зависимость от скорости 241  
Температура бозе-эйнштейновской конденсации 249, 250, 259  
— Ферми 268  
Температурная диффузия 292  
Температурный предел однофотонной отдачи 236, 241, 255  
Тензор 194–196  
— диэлектрической проницаемости 199, 200  
— Леви-Чивита 76, 199, 364  
Тензорная поляризуемость 111, 345  
Тензорное произведение 195  
Теорема Вигнера–Эккарта 26, 67, 86, 128, 134, 138, 149, 160, 186, 209, 284, 333, 336, 361  
— Гаусса 75  
— Найквиста 323  
— о вириале 83  
— Шиффа 210  
Теория возмущений 129, 198, 285, 379  
Теплопроводность 292  
Терм 18  
Толщина скин-слоя 293, 294, 324  
Тонкая структура 25, 33, 35  
  
Угловой момент оператор повышения 55, 228, 288, 362  
— — — понижения 55, 228, 288, 362  
— — правила отбора 198  
Углы Эйлера 114, 344, 359  
Угол веинберговского смешивания 62  
Удвоитель частоты 296  
Удельная теплоемкость 256, 293

Удельное сопротивление 293, 322  
Узкое горло 145, 163  
Ультрахолодные нейтроны (УХН) 328  
Унитарное преобразование 96  
Управляемая фазовая пластинка 306  
Уравнение движения Гейзенберга 134  
— Лапласа 335  
— Лиувилля 345, 373  
— Матье 339  
— Пуассона 45  
— Шредингера 100, 117, 190, 335, 372  
Уравнения Блоха 204  
Уровни Ландау 36  
Усиленное резонатором рассеяние 260  
Усреднение по ансамблю 371  
Уширение давлением 183, 218, 351

Фаза огибающей несущей 322  
Фазовое представление 302  
Фазочувствительное детектирование 202  
Фактор Ланде 29, 35, 85, 181, 190, 232  
— усиления НСЧ в атомах 64  
— — ЭДМ атома 211  
— экстинкции 309  
Фарадеевское вращение 180  
Фейнмановский интеграл пути 317  
Фемтосекундный лазер 318  
Фермионы 20, 266  
Ферромагнитные материалы 327  
Физика вакуума 127  
— конденсированного состояния 48, 249  
Фиктивное поле 98, 99, 104  
Фильтр Лио 312  
Флуоресценция 141, 143, 161, 312, 331  
Формула Бора 17, 83  
— Стирлинга 229, 259  
Формулы суммирования 26  
Фотон поток 139, 350  
— энергия 138, 244  
Фотоупругий модулятор 306  
Функция Бесселя 94, 95, 294, 297  
— Лежандра ассоциированная 283  
— распределения 275

Химический потенциал 250

Цезий 61, 274  
Центробежное искажение 272  
Циклотронное движение 36

Циркулярная поляризация 70, 153, 158, 164, 181, 228, 241, 308, 375

— — анализатор 189

Циркулярное двулучепреломление 181, 200, 343

Циркулярный дихроизм 200, 343

**Частично когерентный ансамбль** 368

Частота биений 322

— Раби 120

Частотная гребенка 318

Частотно-модулированный свет 94, 295

Четвертьволновая пластинка 307, 357

Четное состояние 276, 355

Четырехволновое смешение 187, 303

Чирп 237

Число амагат 351

Чистое состояние 368

**Штарковские биения** 341

Шум Джонсона 323

**ЭДМ** мюона 209

Электрический диполь

— дипольный момент 349

— — — индуцированный 185, 262, 294

— — — коллективный 170

— — — полярная молекула 282

— — — постоянный (ЭДМ) 108, 113, 206, 323

— квадрупольный переход 141

— — оператор 83, 93, 134, 283

— — переход 128, 150, 152, 171, 173, 192, 194

— — правила отбора 81, 83, 207

— — приближение 128, 133, 137

Электрическое поле одиночный фотон 300

Электромагнитное поле

— — гамильтониан 126, 133

— — квантование 123, 128

— — мода 123, 127, 133, 138

— — поляризация 125

— — шум 123

— — энергия 124

Электромагнитно-индуцированная прозрачность 164

Электрон

— заряд 15, 131, 348

— магнитный момент 349

— масса 15, 348

Электроны остова 56

Эллиптически поляризованный свет 184, 308

Энергия диссоциации 269

— нулевых колебаний 127, 267, 270, 302

— Ферми 267

Энтропия 208, 251, 256, 259

Эталон 312

Эффект Зеемана 30, 32, 93

— — динамический 93, 97, 109, 117

— — молекулярный 203

— — статический 202, 242

— Казимира 123, 127

— Керра 184, 319

— Макалузо–Корбино 180

— Мёссбауэра 171

— Саньяка 292, 314

— Ханле 189

— Штарка 84, 85, 93, 94, 96, 97, 101, 102, 114, 117, 198, 207, 208, 213, 258, 262, 345, 346, 349

— — динамический 93, 97, 102, 117, 258, 262, 350

— — квадратичный 84, 213, 345

— — линейный 207

— — статический 83, 94

— Штерна–Герлаха непрерывный 42

Эффекты разрушения спина 227, 233

**Ядерное экранирование** 58

Ядерный квадрупольный момент 35

— магнетон 15

— магнитный резонанс (ЯМР) 286, 332

Ячейка Керра 306

— Поккельса 306

Ячейки квантовой логики 286